



Dédicace

Nous dédions le fruit de ce modeste travail...

A nos parents

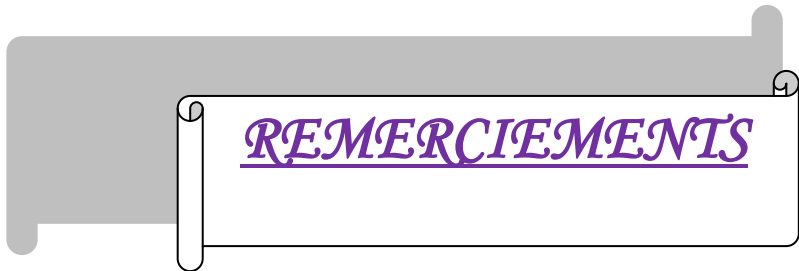
*A qui nous dois ce que nous sommes et envers
qui nous demeurerons reconnaissant toute notre
vie. Rien au monde ne pourrait compenser même
une partie des sacrifices qu'ils ont consentis.*

*Que Dieu vous protège et vous offre santé et
longue vie, pour que nous puissions vous rendre
un jour une partie de ce qu'ils nous ont offert.*

*À tous les membres de notre famille
Que Dieu nous aide à vous procurer le
bonheur et la bienveillance,
À tous ceux qui nous ont aidés afin de réaliser
ce travail,
Et à tous ceux que nous aimons et qui nous
aiment.*



Ed-dahmouny /El manjli



REMERCIEMENTS

Nous tenons à remercier infiniment M. le Professeur **Az-Eddine MARAKKCHI** de nous avoir offert les conditions nécessaires et nous avoir guidé dans l'élaboration de ce travail et contribué largement à sa réalisation avec la patience et le dynamisme qui le caractérisent et aussi son soutien tout au long de notre projet.

Nous tenons également à exprimer notre gratitude et nos remerciements aux membres de jury. Veuillez accepter dans ce travail notre sincère respect et notre profonde reconnaissance.

Nous tenons à remercier les professeurs Izeddine ZORKANI et Anouar JORIO pour tous leurs conseils.

Nous profitons aussi de ce mémoire pour exprimer nos plus vifs remerciements envers tous les professeurs qui nous ont apporté du soutien durant nos études et envers tous nos amis qui ont été toujours près de nous avec leurs encouragements, critiques et conseils.

Que le corps professoral et administratif et surtout les professeurs du département de Physique, ainsi que nos camarades du parcours Physique Des Matériaux, trouvent ici nos vifs remerciements, pour tout le travail effectué durant notre formation à la Faculté.



Sommaire

<u>Dédicace</u>	1
<u>Remerciement</u>	2
<u>Sommaire</u>	3
<u>Introduction</u>	5
<u>Chapitre I : LA DESCRIPTION CLASSIQUE DE L'ATOME D'HYDROGENE ET LE MODELE DE BOHR</u>	6
<u>I-</u> A QUOI SERT L'HYDROGENE ?	7
<u>II-</u> PARTICULE DANS UN POTENTIEL CENTRAL	7
<u>III-</u> INSSUFFISANCE DE LA MECANIQUE CLASSIQUE	8
<u>IV-</u> MODELE DE BOHR	13
IV-1- Théorie de Bohr :	13
IV-2- Insuffisance du modèle de Bohr :	15
<u>Chapitre II : LA THEORIE QUANTIQUE DE L'ATOME D'HYDROGENE</u>	17
<u>I-</u> INTRODUCTION	17
<u>II-</u> SEPARATION DES VARIABLES – INVARIANCE PAR ROTATION	18
<u>III-</u> RESOLUTION DE L'EQUATION RADIALE	20
<u>Chapitre III : THEORIE DES PERTURBATIONS ET L'APPLICATION SUR L'ATOME D'HYDROGENE</u>	27
<u>I-</u> INTRODUCTION	28
<u>II-</u> THEORIE DES PERTURBATIONS	28
II-1- Présentation de la méthode :	28
II-2- Résolution approchée de l'équation aux valeurs propres :	30
II-3- Perturbation d'un niveau non dégénéré :	31
II-4- Perturbation d'un niveau dégénéré :	33
<u>III-</u> STRUCTURE FINE DE L'ATOME D'HYDROGENE (n=2)	33
III-1- Hamiltonien de structure fine:	33
III-2- Corrections sur l'énergie :	35
<u>IV-</u> STRUCTURE HYPERFINE DE L'ATOME D'HYDROGENE (n=1) ..	38

IV-1- Rappel:.....	38
IV-2- Intérêts:	38
IV-3- Hamiltonien de structure hyperfine W_{hf} :	39
IV-4- Structure hyperfine du niveau $n=1$:	40
IV-5- Conclusion:.....	43
V- EFFET D'UN CHAMP EXTERIEUR SUR L'ATOME D'HYDROGENE	43
V-1- Effet Zeeman:	43
V-2- Effet Zeeman de structure hyperfine du niveau fondamental $1s$:	43
V-3- Effet Zeeman en distinction des différents domaines de champ:	45
- Effet Zeeman en champ faible:	45
- Effet Paschen-Back (Effet Zeeman en champ forte):	47
- Effet Zeeman en champ intermédiaire:	49
V-4- Effet Stark:	51
Conclusion Générale.....	54
Bibliographie	55
Annexe	56

Introduction

Vers la fin du XIXème siècle, on pensait que l'évolution des systèmes physiques pouvait être décrite dans le cadre de la mécanique classique. Cependant, certains faits sont restés mal compris et allaient conduire à remettre en question cette croyance, parmi ces faits on trouve le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène.

Après la découverte de la structure de l'atome par Rutherford, Bohr admet que dans l'atome d'hydrogène, l'électron gravite autour du noyau en étant soumis aux forces électrostatiques, il annonça ses règles de quantification et de stationnarité. Malgré certains succès, la combinaison de ces règles avec la mécanique classique a donné des résultats peu satisfaisants. On doit ainsi travailler dans les conditions d'une nouvelle théorie « Théorie Quantique ».

Dans ce travail on va présenter les grandes étapes classiques du traitement physique de l'atome d'hydrogène. Après, on va passer au traitement quantique de cette atome. Les fonctions d'onde des états stationnaires et les énergies propres seront obtenues au moyen de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'Hydrogène.

A cause des effets secondaires liés essentiellement au spin, de nouvelles notions de l'atome d'hydrogène sont développées: la structure fine et la structure hyperfine en sont les effets les plus importants. En présence d'un champ extérieur (magnétique ou électrique) l'énergie d'interaction de cet atome change suivant l'intensité de ce champ. Cela entraîne de nouveaux effets, les effets Zeeman et Stark.

Nous clôturons ce mémoire par une conclusion.

CHAPITRE 1

LA DESCRIPTION CLASSIQUE DE L'ATOME D'HYDROGENE ET LE MODELE DE BOHR

I- A QUOI SERT L'HYDROGENE ?

L'hydrogène est un élément chimique, il appartient au groupe des non-métaux, groupe IIIA du tableau périodique. Les éléments de ce groupe présentent des propriétés très différentes, certains sont gazeux comme l'Hydrogène et d'autres sont solides... En revanche, les non-métaux constituent un groupe extrêmement important car ils renferment les éléments chimiques indispensables à la vie tels que l'Hydrogène, le carbone, l'oxygène et l'azote.

C'est l'élément le plus léger et le plus abondant de l'univers, il est essentiel à la vie et se trouve dans tous les organismes. En 1671, le chimiste et physicien britannique Robert Boyle publie un article dans lequel il décrit la réaction entre du fer et un acide dilué. Il obtient un gaz (en l'occurrence l'hydrogène). Cependant, ce n'est que beaucoup plus tard que l'hydrogène est reconnu en tant qu'élément chimique. En effet, en 1766, le chimiste britannique Henry Cavendish découvre une substance gazeuse qui, en brûlant dans l'air, donne de l'eau. Le chimiste français Antoine de Lavoisier donne le nom grec « hydrogène » à ce gaz inflammable, car il signifie « qui produit de l'eau ». Alors que depuis sa découverte il a été connu comme la plus simple substance dans la nature car il est constitué d'un noyau entouré par un seul électron. Son étude, classique ou quantique, doit en principe se généraliser à l'étude de n'importe quel autre atome. La compréhension de cet élément au niveau de la théorie quantique qui a été introduite pour rendre compte des propriétés des atomes, inexplicables par la mécanique classique, fut une étape importante qui a notamment permis de développer cette théorie. Nous montrerons dans ce mémoire comment la mécanique quantique et en particulier l'équation de Schrödinger et la description de Heisenberg permet de décrire l'atome d'hydrogène et de résoudre les contradictions du modèle de Bohr.

II- PARTICULE DANS UN POTENTIEL CENTRAL :

Un potentiel central est un potentiel qui ne dépend que de la distance r de la particule à l'origine des coordonnées. Il intervient dans de nombreux systèmes physiques dont l'un des plus importants est celui d'une particule plongée dans un potentiel coulombien. Pour une particule classique dans un potentiel central, la force $\vec{F} = -\vec{\nabla} V(r)$

est toujours dirigée vers l'origine et de moment, $\vec{\tau} = \vec{r} \wedge \vec{F}$, nul. Le moment angulaire $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$ est une constante du mouvement. La trajectoire de la particule est située dans un plan passant par l'origine et perpendiculaire à $\vec{L}$. Sa vitesse v peut être décomposée en une composante radiale v_r suivant le rayon vecteur $\vec{r}$ (vitesse radiale) et une composante ortho-radiale $v_{\perp}$ perpendiculaire au rayon vecteur r (vitesse ortho-radiale). L'énergie de la particule est :

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V(r) = \frac{1}{2}mv_r^2 + \frac{1}{2}mv_{\perp}^2 + V(r)$$

Sachant que $\vec{p} = m\vec{v}$ et $L = mrv_{\perp}$ et, on peut encore écrire :

$$E = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) = \frac{p^2}{2m} + V(r) ; \text{ avec } p^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}$$

Pour effectuer la transposition en mécanique quantique, il nous faut écrire le hamiltonien de la particule en remplaçant dans l'expression de l'énergie E les grandeurs physiques classiques exprimées en termes de $\vec{r}$ et $\vec{p}$, par leurs opérateurs correspondant en mécanique quantique et symétriser l'expression, si nécessaire. Nous connaissons déjà, en représentation $\{|r\rangle\}$, les opérateurs p_x, p_y, p_z, p^2 et L^2 , il nous faut maintenant trouver l'expression de l'opérateur p_r^2 . En représentation $\{|r\rangle\}$:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \Rightarrow H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)$$

$$\text{avec: } r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

On appliquera enfin cette étude à la recherche des états propres et énergies propres de l'atome d'hydrogène qui constitue le système atomique le plus simple. Donc premièrement on s'intéresse au problème de la quantification du mouvement d'une particule dans un potentiel central. En mécanique classique, la solution de ce problème repose sur le fait que le moment cinétique est conservé.

III- INSUFFISANCE DE LA MECANIQUE CLASSIQUE :

Après avoir découvert l'atome en tant que constituant microscopique de la matière, il a fallu construire un modèle atomique qui convient bien à la description de la physique

de la matière. La mécanique de Newton, adaptée à l'étude des systèmes macroscopiques, par exemple à l'étude du mouvement des astres, des planètes et des satellites, cède le pas à la mécanique quantique pour l'étude des systèmes microscopiques tels que les atomes, les molécules et les noyaux.

Depuis l'antiquité les grecs voyaient que La matière ne peut pas être divisée infiniment : elle est faite de grains appelés atomes (du grec atomos) ce qui signifie qu'on ne peut pas les partager. Après des centaines années des expérimentateurs développés cette idée. Thomson à découvert l'électron et il voit l'atome comme une sphère microscopique à la surface de laquelle s'accrochent les Z électrons de l'atome, et dans laquelle se répartit de façon homogène la charge positive $+Ze$ de l'atome.

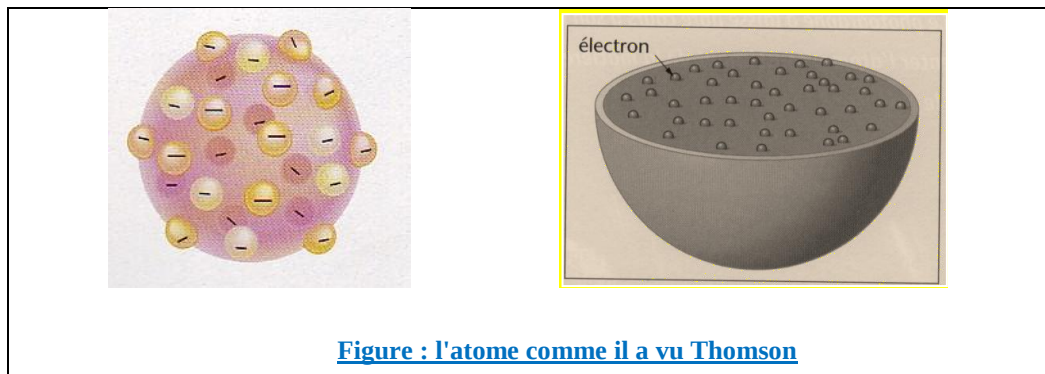
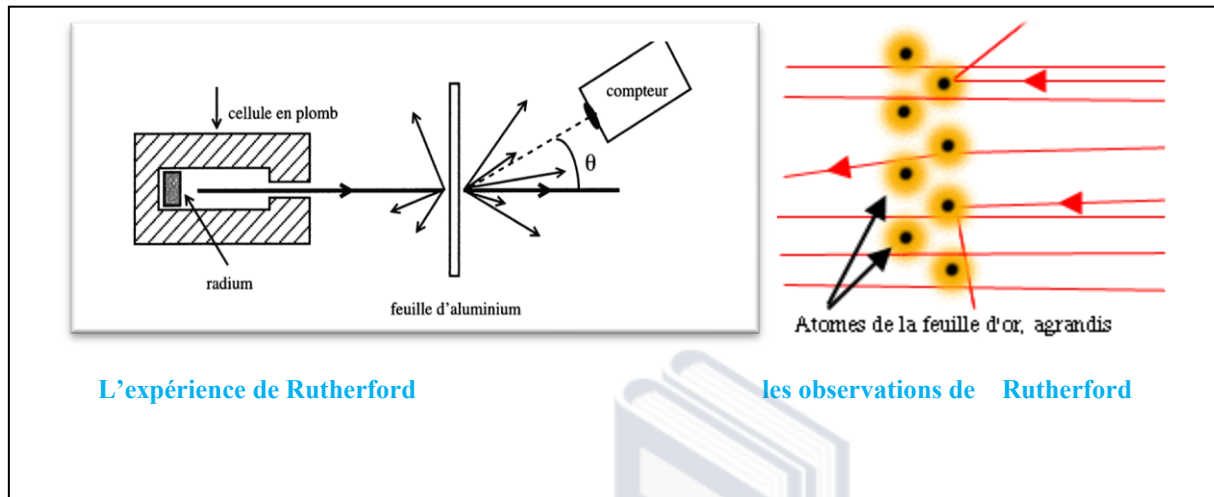


Figure : l'atome comme il a vu Thomson

Les expériences de Geiger et Marsden en 1910, complétées par celles de Rutherford, et surtout interprétées par ce dernier, ont joué un rôle capital à une époque où s'imposait un choix entre les deux modèles d'atomes également valables, celui de Dalton (les atomes se comportent comme des sphères pleines incassables) et celui de Thomson. De fait, Rutherford a prouvé de façon éclatante qu'il existait au centre de l'atome une minuscule concentration de charge et de masse, c'est le noyau. Le principe de l'expérience est simple, des particules α émises par une source de radium sont envoyées perpendiculairement en direction d'une mince feuille métallique, de quelques centièmes de mm d'épaisseur. Un compteur à scintillation mobile permet de dénombrer les particules déviées dans une direction faisant un angle θ par rapport à leur direction incidente. Les résultats, contre toute attente, montrèrent que si la plus grande partie des α étaient peu déviées, une partie d'entre elles subissaient une forte

déviations, certaines allant même jusqu'à faire presque demi-tour (voir la figure ci-dessous), découvrant ainsi un vide énorme au sein de la matière et mettant en évidence l'existence du noyau atomique dans lequel doit se concentrer la charge positive de l'atome. C'est à cause de cette contradiction que le modèle statique compact de Thomson a été rejeté et le modèle dynamique planétaire de Rutherford a été considéré.



En effet, l'électron de l'atome d'hydrogène de charge $q_e = -e$, et de masse m tourne avec une vitesse linéaire v autour du proton de charge $q_p = e$ et de masse $m_p \gg m_e$. En choisissant le repère de Frenet, l'électron soumis à la force de Coulomb d'intensité

$$F_c = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|q_e q_p|}{r^2}. \text{ D'après le 2}^{\text{e}} \text{ principe de Newton :}$$

$$\sum \vec{F} = m\vec{a}, \text{ or selon la normale : } F_c = ma_n, \text{ en remplaçant : } \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|q_e q_p|}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = mv^2 \quad (1)$$

$$r = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m v^2} \quad (2)$$

D'après ce calcul classique, tous les rayons sont permis car il n'existe aucune condition limitant les valeurs possibles de v .

Selon Rutherford, l'électron finira dans cette image, par s'écraser sur le noyau sous l'effet de son accélération centripète... cela donnerait une instabilité à la matière et un état final trop compact à l'univers qui serait alors inaccessible à toute forme de vie.

Ce qui nouveau ici et ce qui ne trouve pas d'explication dans le cadre de la mécanique classique c'est le fait expérimental que les spectres d'absorption ou d'émission de différents types de la matière sont discrets. L'hydrogène, par exemple, ne peut absorber ni émettre que 31 fréquences connues, 4 dans le visible et 27 dans l'ultra-violet.

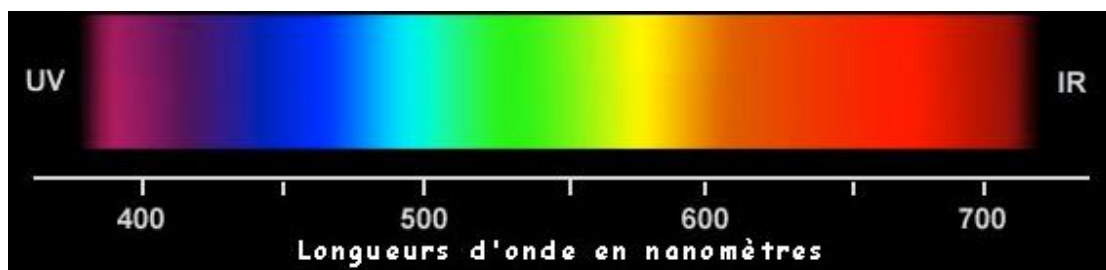


Figure : Spectre constitué de raies discrètes (Balmer, Rydberg)

C'est la série des 31 raies de Balmer de l'atome d'hydrogène. Les quatre premières sont intenses et espacées et les 27 ultra-violetes sont nettement moins intenses et moins espacées :

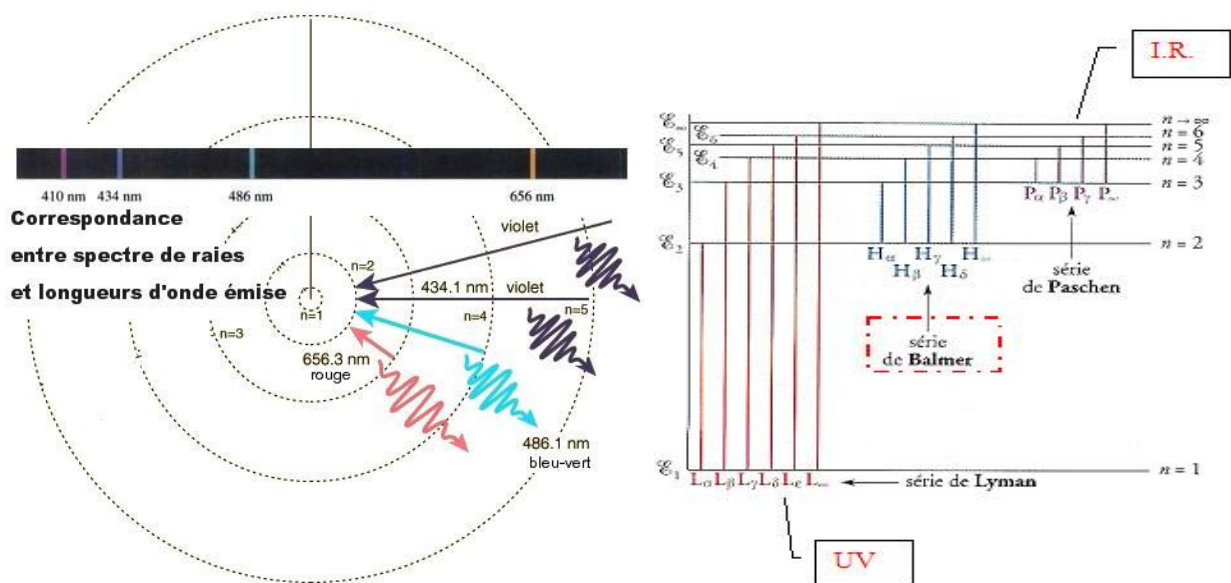


Figure: les différents sauts d'énergie possibles pour l'électron de l'atome d'Hydrogène

Balmer proposa(1885) donc d'écrire que toutes les raies ne répartissent suivant une série, constituant ce que l'on appelle depuis la série de Balmer, dont les longueurs d'onde λ sont données par :

$$\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{p^2} \right) \quad ; p=3,4,\dots$$

$R_y \approx 109677 \text{ cm}^{-1}$ constante de Rydberg

Rydberg généralisa la formule de Balmer à toutes les transitions de l'atome d'hydrogène, en posant que la longueur d'onde de ces constituants était toujours donnée par :

$$\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) \quad ; p=n+1,n+2,\dots$$

Connaissant cette formule, on entreprit de chercher les autres séries de l'Hydrogène. L'étude de l'Hydrogène comme l'élément le plus simple ne fut qu'un point de départ, Ritz permit de généraliser la formule de Balmer en posant que les longueurs d'onde de luminescence de tout atome sont toujours données par la différence de deux quantités T_n appelées termes spectraux :

$$\frac{1}{\lambda_{np}} = T_n - T_p \quad (\text{Règle de Ritz})$$

Pour l'atome d'Hydrogène, le terme spectral général $T_n = R_y \frac{1}{n^2}$

En effet, le modèle planétaire contient deux types de difficultés :

- ❖ L'électron gravite autour du noyau de charge $Z|e|$ grâce au champ de force électrostatique en r^{-2} . le rayon R de la trajectoire supposé circulaire peut être quelconque, donc également la fréquence de rotation aussi, ainsi, toutes les fréquences sont possibles, ceci ne saurait rendre compte du spectre de raies et de ses fréquences remarquables bien définies puisque, classiquement, c'est la fréquence de rotation qui fixe la fréquence d'émission.
- ❖ L'atome n'est pas stable, électro-dynamiquement parlant, comme mentionné à plusieurs reprises. Bohr proposa en 1913 de lever ces difficultés, en effectuant une synthèse entre le principe empirique de Ritz et le photon d'Einstein.

IV- MODELE DE BOHR

IV-1- Théorie de Bohr :

Nous allons rappeler ici le modèle de Bohr qui présente une étude semi-classique, et les résultats de ce modèle relatifs à l'atome d'hydrogène ce modèle remplaçait celui de Rutherford (modèle planétaire) qui, à cause de son approche purement classique, n'était pas dans la mesure d'interpréter l'émission discontinue des spectres atomiques. La discontinuité du spectre de l'atome a permis à Bohr de montrer l'existence d'orbites stationnaires ou d'orbites stables, d'énergie quantifiée E_n et de rayon r_n . Ce modèle qui repose sur la notion de trajectoire et incompatible avec les idées de la mécanique quantique, il permet cependant de corriger quelques notions classiques et d'introduire très simplement des grandeurs fondamentales telles que l'énergie d'ionisation E_I de l'atome d'hydrogène et le rayon de Bohr a_0 qui est un des paramètres caractéristiques des dimensions atomiques. D'autre part, il se trouve que les énergies E_n données par la théorie de BOHR coïncident avec les valeurs propres de l'hamiltonien qu'on va trouver dans l'étude quantique. Ce modèle semi-classique est basé sur l'hypothèse que l'électron décrit autour du proton une orbite circulaire de rayon r obéissant aux équations suivantes:

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}\mu v^2 - \frac{e^2}{r} \quad (1) \quad \frac{\mu v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \quad (2)$$

La 1^{ère} équation exprime que l'énergie totale E de l'électron est la somme de son énergie cinétique $\frac{\mu v^2}{2}$ et de son énergie potentielle $-\frac{e^2}{r}$.

La 2^{ème} équation n'est rien d'autre que l'équation fondamentale de la dynamique newtonienne.

Il y a quantification du moment cinétique orbital $\vec{L}$ de l'électron par rapport au centre de l'orbite, ce moment est un multiple entier de $\frac{h}{2\pi}$ cette équation traduit la condition de quantification introduite de manière empirique par Bohr pour rendre compte de l'existence des niveaux d'énergies discrets, alors que Bohr postule que: Sans émission de rayonnement, les électrons ne peuvent graviter autour du noyau que sur certaines

orbites permises. Celles-ci sont déterminées par la condition de quantification suivante : $\mu v_n r_n = \frac{nh}{2\pi}$, On repéra bien sur les différentes orbites, ainsi quels valeurs correspondantes des diverses grandeurs physiques par l'entier n qui représente le nombre quantique.

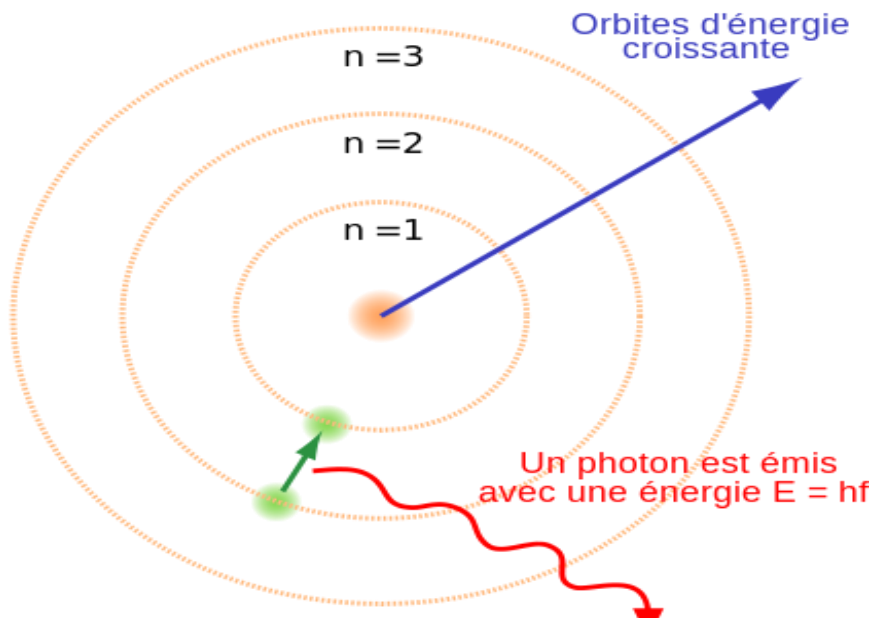


Figure : L'atome de Niels Bohr

Un calcul très simple donne alors les expressions de E_n , r_n et v_n :

$$E_n = -\frac{1}{n^2} E_1, \quad r_n = n^2 a_0 \quad \text{et} \quad v_n = \frac{1}{n^2} \frac{e^2}{h} = \frac{1}{n^2} v_0$$

avec :

$E_1 = \frac{\mu e^4}{2h^2}$ est l'énergie d'ionisation

$a_0 = \frac{h^2}{\mu e^2}$ est le rayon de Bohr

L'énergie d'ionisation E_1 et de rayon de Bohr a_0 jouent un rôle important, ces quantités donnent un ordre de grandeur des énergies et de l'extension spatiale des fonctions d'ondes associés aux états liés de l'atome d'hydrogène. On refaire l'écriture de ces deux grandeurs :

$E_I = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu c^2$ et $a_0 = \frac{1}{\alpha} \lambda_c$ ou α est la constante de structure fine, qui est une constante de structure fine, qui est une constante sans dimension jouant un rôle très important en physique en général,

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \text{ et } \lambda_c = \frac{h}{\mu c} = 3.861591 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}$$

Comme μ est peut différent de m_e , masse au repos de l'électron, λ_c est pratiquement égal à la longueur d'onde de Compton de l'électron.

IV-2- Insuffisance du modèle de Bohr :

Au cours du développement de la mécanique quantique cette théorie a eu un succès considérable, Bohr la considérait comme « la voie royale vers la quantification », et à partir de 1915, on a essayé de l'appliquer à différents problèmes. Elle souffre néanmoins de sérieux inconvénients:

- ❖ D'un point de vue pratique, elle se base sur les variables action-angle. Elle suppose donc qu'on peut résoudre l'équation de Hamilton-Jacobi. Mais c'est en général impossible. Du coup, il a fallu développer des stratégies d'approximation pour les problèmes non-séparables, qui sont en général plus compliquées que le formalisme moderne.
- ❖ Cette théorie est limitée aux orbites périodiques et ne fait aucune prédiction sur la diffusion des électrons, qui pourtant, comme nous le verrons, révèle des effets quantiques tout aussi importants.
- ❖ Mais le problème le plus fondamental est que cette théorie ne donne qu'une recette sans remettre en cause la formulation de la mécanique ou de l'électrodynamique classique. Une particule chargée émet, en électrodynamique classique, des ondes électromagnétiques. Elle doit donc perdre de l'énergie, et l'électron devrait finalement s'effondrer sur le noyau. Si cela ne se produit pas, il doit y avoir une raison plus profonde sur laquelle la théorie des quanta ne nous dit rien.

- ❖ Finalement, si elle conduit au résultat rigoureusement exact pour le potentiel coulombien, on sait désormais qu'elle n'est pas exacte en général. Elle est valable dans la limite $h \rightarrow 0$ (elle donne le résultat dominant pour h petit).

Exemple : problème de l'oscillateur Harmonique, l'hamiltonien caractéristique est $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$ d'où $E_n = \hbar \omega n$; or d'après la théorie des quanta le résultat exact est $E_n = \hbar \omega (n + 1/2)$.

Pour aller au-delà, il faut que la quantification des énergies possibles soit une conséquence logique de la théorie. Il faut donc modifier les hypothèses de départ. Une possibilité qui pourrait sembler naturelle serait de modifier l'hamiltonien d'un système comme l'atome d'hydrogène pour que seules certaines trajectoires soient possibles, mais une telle approche reviendrait à remettre en cause la forme des lois de la physique des phénomènes à l'échelle macroscopique, ce qui n'est pas du tout satisfaisant. En 1925, un jeune physicien, Werner Heisenberg (alors âgé de 24 ans), propose que ce n'est pas la forme de l'hamiltonien qu'il faut modifier, mais que c'est plutôt la notion même de trajectoire qu'il faut abandonner. Après tout, personne n'a pu observer le mouvement d'un électron autour d'un noyau. Tout ce qu'on a pu observer, ce sont les niveaux d'énergie possibles de l'électron autour du noyau. Alors que Heisenberg a énoncé son principe : il est impossible de définir à un instant donné à la fois la position de la particule et son impulsion avec une précision arbitraire, il a traduit ce principe par une relation, Relation d'Incertainitude de Heisenberg (RIH) :

$$\Delta X \cdot \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}$$

Le cheminement intellectuel qui a amené Heisenberg à cette hypothèse est assez compliqué, mais lorsqu'on applique à l'atome d'Hydrogène, il permet de comprendre l'existence d'un état fondamental stable, et pas une orbite circulaire de rayon quantifié comme prévoit Bohr.

CHAPITRE 2
LA THEORIE
QUANTIQUE DE L'ATOME
D'HYDROGENE

I- INTRODUCTION

Dans ce chapitre de notre mémoire, nous montrons comment la mécanique quantique, et en particulier l'équation de Schrödinger, permet de décrire l'atome d'hydrogène et de résoudre les contradictions du modèle de Bohr introduit dans le chapitre précédent.

On a $m_p = 1.7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ et $m_e = 0.91 \cdot 10^{-30} \text{ kg}$, comme $m_p \gg m_e$, la masse réduite μ du système est très voisin de m_e tel que :

$$\mu = \frac{m_p m_e}{m_e + m_p} \approx m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right) \approx m_e$$

L'atome d'hydrogène sera écrit en faisant l'approximation que le noyau, dont la masse est 1836 fois celle de l'électron, constitue le centre de gravité du système ou il est immobile, ce qui revient à négliger son énergie cinétique. L'énergie cinétique de l'atome se réduit donc à celle de l'électron ; il lui associe l'opérateur- $\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$. L'interaction entre les deux particules de l'atome d'hydrogène est essentiellement d'origine électrostatique, l'énergie potentielle correspondante étant :

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{e^2}{r} \text{ ou } r = |r_1 - r_2|$$

Donc on est en présence d'un problème à deux corps en interaction relative d'où il peut être ramené à un problème à un seul corps de masse μ qui se déplace dans un potentiel relatif $V(r)$ équivalent à un champ de force central ayant sa source au centre de masse du système.

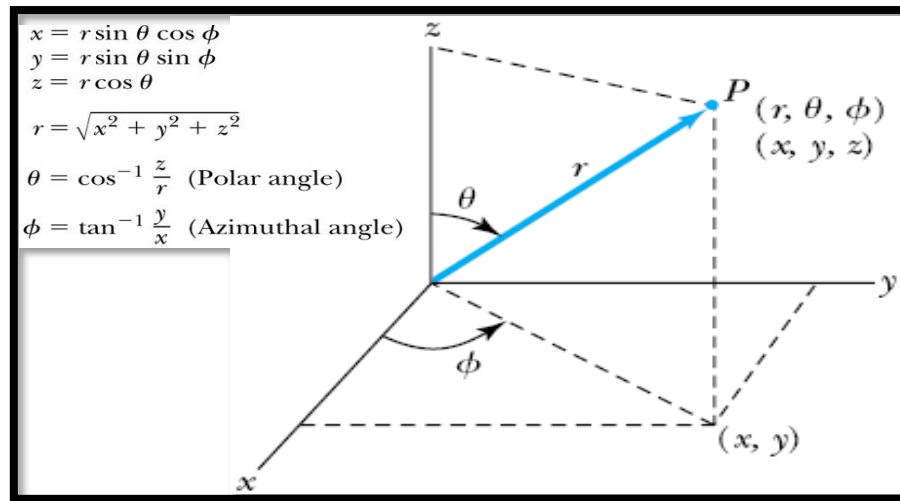
II- SEPARATION DES VARIABLES – INVARIANCE PAR ROTATION :

En mécanique quantique, on cherche à résoudre l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien H , observable associé à l'énergie totale. Cette équation s'écrit en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad (1)$$

C'est-à-dire on cherche les fonctions propres $\varphi(\vec{r})$ comme fonctions des variables r, θ et φ en symétrie sphérique.

Dans plusieurs problèmes importants en pratique, la force est centrale de sorte que le potentiel n'est fonction que de la distance r à l'origine et non de l'orientation. Il est donc naturel, dans ce cas, de travailler en coordonnées sphériques, tel que :



Dans ces coordonnées, le laplacien prend la forme :

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (2)$$

Comme l'opérateur moment cinétique $\vec{L}$ n'agit que sur les variables angulaires θ et φ ; il commute par conséquent avec tout opérateur n'agissant que sur la dépendance en r , alors que L^2 prend la forme suivant :

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right) \quad (3)$$

D'où H prend la forme :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2\mu r^2} L^2 - \frac{e^2}{r} \quad (4)$$

D'où l'équation de Schrödinger devient :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2\mu r^2} L^2 - \frac{e^2}{r} \right) \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad (5)$$

En effet, nous pouvons utiliser seulement L^2 et L_z pour résoudre l'équation aux valeurs propres car les quatre constantes du mouvement (L_x, L_y, L_z et L^2) ne commutent pas entre elles, au contraire on a $[H, \vec{L}] = 0$, par conséquent les trois observables H, L^2 et L_z commutent en formant une base de l'espace des états de l'atome d'hydrogène, en particulier les fonctions propres communes à ces trois observables, et on cherche alors à résoudre le système d'équations différentielles :

$$\begin{cases} H\varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \\ L^2\varphi(\vec{r}) = l(l+1)\hbar^2\varphi(\vec{r}) \\ L_z\varphi(\vec{r}) = m\hbar\varphi(\vec{r}) \end{cases}$$

Les solutions $\varphi(\vec{r})$ de ce système d'équations, correspondant à des valeurs de l et m fixées, sont forcément des produits d'une fonction de r seul par l'harmonique sphérique $Y_l^m(\theta, \phi)$:

$$\varphi_n(r, \theta, \phi) = R_{k,l}(r)Y_l^m(\theta, \phi) \quad (6)$$

La forme de H assure cette décomposition, comme on a vu c'est une combinaison linéaire de deux opérateurs, l'un radial et l'autre angulaire, ou les coefficients multiplicatifs dépendent au plus des variables autres que celles concernées par l'opérateur.

$R_{n,l}(r)$ dépend de n , indice de la valeur propre, et de l car, comme on peut le voir ci-dessus, à chaque valeur de l correspond une équation particulière de $R(r)$.

On rappelle que $Y_l^m(\theta, \phi)$ a été construit de telle sorte que les parties radiales et angulaires soient normalisées séparément.

Problème posé : déterminer $R_{k,l}(r)$ pour que $\varphi_n(r, \theta, \phi)$ soit aussi fonction propre de H et vérifié : $H\varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$

III- RESOLUTION DE L'EQUATION RADIALE :

Reportons les équations (5) et (6) dans l'équation $H\varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$. Comme $\varphi(\vec{r})$ est une fonction propre de L^2 avec la valeur propre $l(l+1)\hbar^2$, on voit que

$Y_l^m(\theta, \phi)$ se met en facteur dans chacun des deux membres ; après simplification on obtient l'équation radiale :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] R_{k,l}(r) = E_{k,l} R_{k,l}(r) \quad (7)$$

En général, une solution de l'équation radiale (7), reportée dans (6), ne donne pas nécessairement une solution de l'équation aux valeurs propres (1) de l'hamiltonien, à cause de l'expression du laplacien (2) qui n'est pas forcément valable en $r=0$, donc $R(r)$ doit être suffisamment régulier.

L'équation à résoudre dépend de l , et fait intervenir la seule variable r , alors on cherche les valeurs et fonctions propres d'un opérateur H_l différent pour chaque valeur de l . Nous noterons $E_{k,l}$ les valeurs propres de l'hamiltonien H à l'intérieur d'un sous-espace $\varepsilon(l, m)$ déterminé, l'indice k qui peut être discret ou continu, permet de repérer les différentes valeurs propres associées à la même valeur l .

On peut simplifier l'opérateur différentiel à étudier en changeant de fonction. Posons en effet :

$$R_{k,l}(r) = \frac{1}{r} u_{k,l}(r) \quad (8)$$

$$\text{D'où } \varphi(\vec{r}) = \frac{1}{r} u_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (9)$$

$u_{k,l}(r)$ est donné par l'équation radiale suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] u_{k,l}(r) = E_{k,l} u_{k,l}(r) \quad (10)$$

Cette équation est analogue à un problème à une dimension où la particule soumise à un potentiel effectif $V_{\text{eff}}(r)$ tel que :

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \quad (11)$$

On est obligé d'adjoindre à l'équation (10) les conditions :

$$\text{Le comportement à l'origine : } u_{k,l}(r = 0) = 0 \quad (12)$$

Cette condition assure la continuité de la fonction d'onde en $r=0$, à cause que le potentiel effectif est infini pour toutes les valeurs négatives de la variable.

La normalisation : les fonctions $\phi_{k,l,m}(r, \theta, \varphi)$ doivent en principe être de carré sommable :

$$\int_0^\infty r^2 dr R_{k,l}^*(r) R_{k,l}(r) = \int_0^\infty dr u_{k',l}^*(r) u_{k,l}(r) = \delta(k' - k) \quad (13)$$

Pour simplifier les raisonnements, nous allons prendre a_0 et E_I comme unités de longueur et d'énergie respectivement, c'est-à-dire introduire les quantités sans dimension :

$$\rho = r/a_0 \quad ; \quad a_0: \text{Le rayon de Bohr}$$

$$\lambda_{k,l} = \sqrt{-E_{k,l}/E_I} \quad ; \quad E_I: \text{L'énergie d'ionisation}$$

Après la simplification on trouve l'équation radiale qui nous cherche à résoudre :

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda_{k,l}^2 \right\} u_{k,l}(\rho) = 0 \quad (14)$$

 *Comportement asymptotique :*

$$\text{Pour } \rho \rightarrow \infty : \text{on aura } \left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - \lambda_{k,l}^2 \right\} u_{k,l}(\rho) = 0$$

Les termes en $\frac{1}{\rho}$ et $\frac{1}{\rho^2}$ deviennent négligeables devant $\lambda_{k,l}^2$ d'où $u_{k,l}(\rho)$ peut prendre soit $e^{-\lambda_{k,l} \rho}$, ce résultat est divergent, c'est-à-dire $u_{k,l}(\rho)$ doit être bornée à l'infini, soit $e^{\lambda_{k,l} \rho}$. D'ailleurs ce raisonnement n'est pas parfaitement rigoureux car nous avons totalement négliger les termes en $\frac{1}{\rho}$ et $\frac{1}{\rho^2}$.

On fait à nouveau un changement de variable en posant :

$$u_{k,l}(\rho) = e^{-\lambda_{k,l} \rho} y_{k,l}(\rho) \quad (15)$$

L'équation différentielle qui doit vérifier $y_{k,l}(\rho)$ se réduit à :

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda_{k,l} \frac{d}{d\rho} + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \right\} y_{k,l}(\rho) = 0 \quad (16)$$

avec $y_{k,l}(0) = 0$

On cherche des solutions sous forme de série entière :

$$y_{k,l}(\rho) = \rho^s \sum_{q=0}^{\infty} a_q \rho^q \quad \text{Avec } s \geq 0 \text{ et } a_0 \neq 0 \quad (17)$$

On cherche alors, à calculer $\frac{d}{d\rho} y_{k,l}(\rho)$ et $\frac{d^2}{d\rho^2} y_{k,l}(\rho)$ à partir de cette série entière.

$$\begin{cases} \frac{d}{d\rho} y_{k,l}(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} a_q (q+s) \rho^{q+s-1} \\ \frac{d^2}{d\rho^2} y_{k,l}(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} a_q (q+s)(q+s-1) \rho^{q+s-2} \end{cases} \quad (18)$$

En reportant dans l'équation (16), on obtient :

$$\begin{aligned} \sum_{q=0}^{\infty} a_q (q+s)(q+s-1) \rho^{q+s-2} - 2\lambda_{k,l} \sum_{q=0}^{\infty} a_q (q+s) \rho^{q+s-1} + 2 \sum_{q=0}^{\infty} a_q \rho^{q+s-1} \\ - l(l+1) \sum_{q=0}^{\infty} a_q \rho^{q+s-2} = 0 \end{aligned}$$

Pour $q=0$:

$$s(s-1)a_0\rho^{s-2} - 2\lambda_{k,l} s a_0\rho^{s-1} + 2\rho^{s-1} a_0 - l(l+1)\rho^{s-2} a_0 = 0$$

$$[s(s-1) - l(l+1)] a_0\rho^{s-2} + 2(1 - \lambda_{k,l}) a_0\rho^{s-1} = 0 \quad (19)$$

Si le coefficient du terme de plus bas degré est nul, on obtient

$$[s(s-1) - l(l+1)] a_0 = 0 \quad (20)$$

Or $a_0 \neq 0$, donc s peut prendre l'un de ses deux valeurs

$$\begin{cases} s = (l+1) & \rightarrow \text{vérifié la condition } y_{k,l}(0) = 0 \\ s = -l & \rightarrow \text{rejeté physiquement} \end{cases}$$

D'une manière générale, on obtient par la méthode de récurrence la relation suivante :

$$q(q + 2l + 1)a_q = 2[(q + l)\lambda_{k,l} - 1]a_{q-1} \quad (21)$$

$$\rightarrow \frac{a_q}{a_{q-1}} = \frac{2[(q + l)\lambda_{k,l} - 1]}{q(q + 2l + 1)} q \xrightarrow{\infty} \frac{2\lambda_{k,l}}{q}$$

Si on fixe a_0 par la condition de normalisation, on peut alors déterminer toute la série entière par la relation de récurrence.

 *Quantification de $\lambda_{k,l}$:*

On a : $\frac{a_q}{a_{q-1}} q \xrightarrow{\infty} \frac{2\lambda_{k,l}}{q}$, or le développement en série entière de la fonction $e^{2\rho\lambda_{k,l}}$ s'écrit $e^{2\rho\lambda_{k,l}} = \sum_{q=0}^{\infty} b_q \rho^q$ avec $b_q = \frac{2\lambda_{k,l}^q}{q!}$ ce qui donne $\frac{b_q}{b_{q-1}} = \frac{2\lambda_{k,l}}{q}$ Pour les grandes valeurs de ρ , $u_{k,l}(\rho)$ correspondante est en $e^{+\rho\lambda_{k,l}}$, ce qui n'est pas acceptable physiquement par conséquent, il faut rejeter tous les cas où le développement de $y_k(\rho)$ est une série infinie, donc les valeurs possibles de $\lambda_{k,l}$ sont celles pour lesquelles $y_{k,l}(\rho)$ ne comporte qu'un nombre fini de termes, il suffit que :

$$\left\{ \exists q = k \in \frac{N^*}{[(q + 1)\lambda_{k,l} - 1]} = 0 \right\}$$

D'après (20), en prenons en considération que a_0 ne s'annule jamais, on a alors :

$$\lambda_{k,l} = \frac{l}{k+l} \quad (22)$$

 *Quantification de l'énergie :*

$$\text{On a démontré que } \lambda_{k,l} = \frac{l}{k+l}, \text{ d'où } E_{k,l} = -\frac{E_I}{(k+l)^2} \quad (23)$$

Pour l fixé on a une infinité de valeurs possibles pour l'énergie, correspondant à $k=0, 1, 2, \dots$ c'est une dégénérescence essentielle lié au fait que l'équation radiale dépend que du l et non pas du m .

$E_{k,l}$ ne dépend pas du k et l séparément, mais seulement de leur somme, $n=k+l$. En termes de notations on a : $E_{k,l} \equiv E_n$

n : nombre quantique principale, décrit les couches (K, L, M...)

l : décrit les sous-couches (s, p, d, f)

si l'on se fixe une valeur de n , plusieurs valeurs de l sont possibles : $l=0, 1, 2, \dots, n-1$; à chacune de ses valeurs de l correspondent $(2l+1)$ valeurs possibles pour m : $m=-l, -l+1, \dots, l-1, l$. Par suite, la dégénérescence du niveau E_n est :

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} = n^2$$

Récapitulons les énergies possibles dans le tableau ci dessous:

	$l=0$	$l=1$	$l=2$	l
$k=1$	$-E_I$	$-\frac{E_I}{4}$	$-\frac{E_I}{9}$	$-\frac{E_I}{(l+1)^2}$
$k=2$	$-\frac{E_I}{4}$	$-\frac{E_I}{9}$	$-\frac{E_I}{16}$	
$k=3$	$-\frac{E_I}{9}$	$-\frac{E_I}{16}$		
k	$-\frac{E_I}{k^2}$			$-\frac{E_I}{(k+1)^2}$

En prenant en considération le changement de notation $n=k+l$, les fonctions radiales données au chapitre précédent deviennent :

$$R_{k=1,l=0} \equiv R_{n=1,l=0} ; R_{k=2,l=0} \equiv R_{n=2,l=0} ;$$

$$R_{k=1,l=1} \equiv R_{n=2,l=1}$$

D'une manière général les fonctions radiales sont donné par :

$$R_n(\rho) = C \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

On donne les expressions des fonctions d'ondes des niveaux d'énergie de plus bas degré :

Niveau 1s	$\varphi_{n=1,l=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$
Niveau 2s	$\varphi_{n=1,l=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
Niveau 2p	$\varphi_{n=2,l=1,m=1} = -\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin\theta e^{i\varphi}$ $\varphi_{n=2,l=1,m=0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos\theta$ $\varphi_{n=2,l=1,m=-1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin\theta e^{-i\varphi}$

CHAPITRE 3
THEORIE DES
PERTURBATIONS ET
L'APPLICATION SUR
L'ATOME D'HYDROGENE

I- INTRODUCTION

Nous nous proposons dans ce chapitre d'introduire les effets relativistes liés à l'atome d'Hydrogène, ces effets à cause des effets magnétiques liés au spin de l'électron, et le spin du proton et les interactions magnétiques correspondantes ; d'ailleurs la théorie de l'atome d'hydrogène que nous avons développée précédemment ne tient compte que de l'interaction électrostatique entre le proton et l'électron. Il existe cependant des méthodes d'approximation qui permettent, dans certains cas, d'obtenir analytiquement des solutions approchées de l'équation aux valeurs propres fondamentale.

Nous allons étudier alors l'une de ces méthodes, que l'on désigne sous le nom de « théorie des perturbations stationnaires » qui est très largement utilisée en physique quantique, car elle correspond très bien à la démarche habituelle des physiciens, cette théorie nous permet d'expliquer l'apparition de ce qu'on appelle « structure fine » ainsi qu'une « structure hyperfine ». Mentionnons enfin les effets magnétiques de l'atome d'hydrogène plongé dans un champ magnétique statique et uniforme, tels que l'effet Zeeman et l'effet Stark.

II- THEORIE DES PERTURBATIONS

II-1- Présentation de la méthode :

La théorie des perturbations est applicable lorsque l'hamiltonien H du système étudié peut être mis sous la forme :

$$H = H_0 + W \quad (1)$$

Où les états propres et valeurs propres de H_0 sont connus, et où W est petit devant H_0 . L'opérateur H_0 , indépendant du temps, est appelé « hamiltonien non-perturbé », W est la « perturbation ». Si W ne dépend pas du temps, on dit que l'on a affaire à une « perturbation stationnaire ». Le problème est de trouver les modifications apportées aux niveaux d'énergie du système et à ses états stationnaires par l'adjonction de la perturbation W . alors la théorie des perturbations consiste à développer les valeurs

propres et les états propres de H en puissance d'un paramètre réel λ , sans dimension ;
En fait :

$$W = \lambda W' \quad \text{avec } \lambda \ll 1 \quad (2)$$

W' étant un opérateur dont les éléments de matrice sont comparable à ceux de H_0 .

D'où l'hamiltonien du système qui caractérise l'intensité de la perturbation, donné en fonction de λ :

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda W' \quad (3)$$

Les valeurs propres $E(\lambda)$ de $H(\lambda)$ [observable] dépendent en général de λ , pour une valeur donnée de λ , on associe un vecteur propre de l'observable $H(\lambda)$, ces vecteurs forment une base de l'espace des états.

D'ailleurs, le spin apparaît de façon naturelle lorsqu'on essaie d'établir pour l'électron une équation satisfaisant à la fois aux postulats de la relativité restreinte et à ceux de la mécanique quantique. Une telle équation existe : c'est l'équation de Dirac, qui a permis de rendre compte de nombreux phénomènes (structure fine de l'hydrogène, spin de l'électron, etc....)

Pour notre atome (d'hydrogène), la façon la plus rigoureuse d'obtenir l'expression de l'ensemble des corrections relativistes consiste à écrire l'équation de Dirac pour un électron plongé dans le potentiel $V(R)$ crée par le proton que l'on considère infiniment lourd et immobile à l'origine des coordonnées, puis à chercher la forme limite que prend cette équation lorsque le système est faiblement relativistes ; on obtient alors pour l'hamiltonien H une expression telle que : [formule (1)], ou W apparaît sous forme d'un développement en $\frac{v}{c}$, entièrement calculable, avec :

$$H = m_e c^2 + \frac{p^2}{2m_e} + V(R) - \frac{p^4}{8m_e^3 c^2} + \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{R} \frac{dV(R)}{dR} L \cdot S + \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \Delta V(R) + \dots \quad (4)$$

Avec :

$m_e c^2$: L'énergie au repos de l'électron

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_e} + V(R) \text{ L'hamiltonien non-perturbé dite aussi non-relativiste.}$$

Et les derniers termes qui s'ajoutent sont appelés, termes de structure fine.

II-2- Résolution approché de l'équation aux valeurs propres :

Nous cherchons les états propres $|\psi(\lambda)\rangle$ et les valeurs propres $E(\lambda)$ de l'opérateur hermitique $H(\lambda)$:

$$H(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle \quad (5)$$

Pour cela on développe les valeurs propres et les états propres de $H(\lambda)$ en puissances de λ .

Soit les développements :

$$\begin{cases} E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \dots + \lambda^q\varepsilon_q + \dots \\ |\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \dots + \lambda^q|q\rangle + \dots \end{cases} \quad (6)$$

Les valeurs propres et les états propres de H_0 , $\{E_p^0, |\phi_p^i\rangle\}$ sont supposés connus. Les états propres de H_0 vérifient les relations d'ortho-normalité habituelles :

$$\langle \phi_p^i | \phi_{p'}^{i'} \rangle = \delta_{p,p'} \delta_{i,i'}, \quad \sum_p \sum_i |\phi_p^i\rangle \langle \phi_p^i| = 1$$

Portons les développements $E(\lambda)$ et $|\psi(\lambda)\rangle$, ainsi que la définition de $H(\lambda)$ donnée en (3), dans l'équation (5) :

$$(H_0 + \lambda W') [\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle] = [\sum_{q'=0}^{\infty} \lambda^{q'} \varepsilon_{q'}] [\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle]$$

En égalant les puissances successives de λ , on obtient ainsi :

$$\text{*ordre 0} \rightarrow H_0 |0\rangle = \varepsilon_0 |0\rangle$$

$$\text{*ordre 1} \rightarrow (H_0 - \varepsilon_0) |1\rangle + (W' - \varepsilon_1) |0\rangle = 0$$

$$\text{*ordre 2} \rightarrow (H_0 - \varepsilon_0) |2\rangle + (W' - \varepsilon_1) |1\rangle - \varepsilon_2 |0\rangle = 0$$

$$* \text{ordre } q \rightarrow (H_0 - \varepsilon_0)|q\rangle + (W' - \varepsilon_1)|q-1\rangle - \varepsilon_2|q-2\rangle \dots - \varepsilon_q|0\rangle = 0$$

On impose à $|\psi(\lambda)\rangle$ d'être normé et on choisit sa phase de façon que $\langle 0|\psi(\lambda)\rangle$ soit réel :

$$\begin{aligned} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{ordre } 0 \rightarrow \langle 0|0\rangle = 1 \\ \text{ordre } 1 \rightarrow \langle \psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = [\langle 0| + \lambda\langle 1|][|0\rangle + \lambda|1\rangle] + 0(\lambda^2) \\ \phantom{\text{ordre } 1 \rightarrow} = \langle 0|0\rangle + \lambda[\langle 1|0\rangle + \langle 0|1\rangle] + 0(\lambda^2) \end{array} \right. \end{aligned}$$

$$\text{donc: } \langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 1$$

$$\text{De même : } \langle 0|2\rangle = \langle 2|0\rangle = \frac{-1}{2}\langle 1|1\rangle$$

ordre $q \rightarrow$

$$\langle 0|q\rangle = \langle q|0\rangle =$$

$$\frac{-1}{2}[\langle q-1|1\rangle + \langle q-2|2\rangle + \dots \langle 2|q-2\rangle + \langle 1|q-1\rangle]$$

Si on se limite à l'ordre 2, les équations de perturbations sont donc :

$$\left\{ \begin{array}{l} H_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle \\ (H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (W' - \varepsilon_1)|0\rangle = 0 \quad (*) \\ (H_0 - \varepsilon_0)|2\rangle + (W' - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0 \quad (**) \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{l} \langle 0|0\rangle = 1 \\ \langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0 \\ \langle 0|2\rangle = \langle 2|0\rangle = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle \end{array} \right.$$

II-3- Perturbation d'un niveau non dégénéré :

Soit E_n^0 une valeur propre non dégénérée de H_0 et $|\varphi_n\rangle$ le vecteur propre correspondant.

On a donc, avec ce qui précède, la correspondance : $\varepsilon_0 = E_n^0$ et $|0\rangle = |\varphi_n\rangle$.

 Correction au premier ordre de l'énergie :

En multipliant (*) par le bra $\langle \varphi_n|$, on obtient :

$$\langle \varphi_n|(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + \langle \varphi_n|(W' - \varepsilon_0)|\varphi_n\rangle$$

$$\Rightarrow \varepsilon_1 = \langle \varphi_n|(W')|0\rangle = \langle \varphi_n|W'|\varphi_n\rangle$$

$$D'où : E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle$$

Donc la correction au premier ordre à une énergie non dégénérée est égale à la valeur moyenne du terme de perturbation W dans l'état non perturbé $|\varphi_n\rangle$.

 *Correction du premier ordre sur l'état :*

$$\langle \varphi_p^i | (H_0 - \varepsilon_0) | 1 \rangle + \langle \varphi_p^i | (W' - \varepsilon_1) | \varphi_n \rangle = 0 \quad (p \neq n)$$

$$(E_p^0 - E_n^0) \langle \varphi_p^i | 1 \rangle + \langle \varphi_p^i | W' | \varphi_n \rangle = 0$$

$$\langle \varphi_p^i | 1 \rangle = \frac{1}{E_n^0 - E_p^0} \langle \varphi_p^i | W' | \varphi_n \rangle \quad (p \neq n); \quad \langle \varphi_n | 1 \rangle = 0$$

On connaît $|1\rangle$ par son développement sur la base des $\{|\varphi_p^i\rangle\}$:

$$|1\rangle = \sum_p \sum_i |\varphi_p^i\rangle \langle \varphi_p^i | 1 \rangle \quad \text{soit: } |1\rangle = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | W' | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle$$

$$D'où : |\psi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | W' | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle$$

La correction du premier ordre au vecteur d'état est une superposition linéaire de tous les états non-perturbés autres que $|\varphi_n\rangle$: on dit que la perturbation entraîne une « contamination » de l'état $|\varphi_n\rangle$ par les autres états propres de H_0 . La contribution d'un état $|\varphi_p^i\rangle$ donné, est nulle si W n'a pas d'élément de matrice entre $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_p^i\rangle$; de façon générale, la contamination par $|\varphi_p^i\rangle$ est d'autant plus importante que le couplage induit par W entre $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_p^i\rangle$ est plus fort et que le niveau E_p^0 est plus proche du niveau E_n^0 étudié.

 *Correction au deuxième ordre de l'énergie :*

En multipliant (**) par le bras $\langle \varphi_n |$ on obtient :

$$\langle \varphi_n | (H_0 - \varepsilon_0) | 2 \rangle + \langle \varphi_n | (W' - \varepsilon_1) | 1 \rangle - \varepsilon_2 \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 0$$

$$\varepsilon_2 = \langle \varphi_n | W' | 1 \rangle = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | W' | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0}$$

$$D'où : E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0}$$

Donc au second ordre, le niveau $|\varphi_p^i\rangle$ repousse le niveau $|\varphi_n\rangle$ d'autant plus qu'il est proche de lui et que le couplage $|\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle|$ est plus intense.

II-4- Perturbation d'un niveau dégénéré :

A E_n^0 dégénérée g_n fois correspond le sous-espace propre E_n^0 de H_0 . $|0\rangle \in E_n^0$
 $\langle \varphi_n^i | W' | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle$

En injectant la relation de fermeture $\sum_p \sum_{i'} |\varphi_p^{i'}\rangle \langle \varphi_p^{i'}| = 1$ entre W' et $|0\rangle$:

$$\sum_p \sum_{i'} \langle \varphi_n^i | W' | \varphi_p^{i'} \rangle \langle \varphi_p^{i'} | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle$$

$$\longrightarrow \sum_{i'=1}^{g_n} \langle \varphi_n^i | W' | \varphi_n^{i'} \rangle \langle \varphi_n^{i'} | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle$$

$$\longleftrightarrow W^{(n)} | 0 \rangle = \varepsilon_1 | 0 \rangle$$

Pour calculer les valeurs propres à l'ordre 1 et les états propres à l'ordre 0 de H , qui correspondent à un niveau non perturbé E_n^0 dégénéré, on diagonalise la matrice $W^{(n)}$ qui représente la perturbation W à l'intérieur du sous-espace propre E_n^0 associé à E_n^0 .

III- STRUCTURE FINE DE L'ATOME D'HYDROGENE (n=2)

III-1- Hamiltonien de structure fine :

 Correction de l'énergie cinétique :

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \rightarrow E = mc^2 \left(1 + \frac{p^2}{m^2 c^2} \right)^{1/2} \approx mc^2 \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m^2 c^2} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2} \right\}$$

$$E = mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2} \rightarrow \text{variation de la masse avec la vitesse.}$$

$$\longrightarrow W_r = -\frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2}$$

$$\text{Ordre de grandeur : } \frac{W_r}{H_0} \approx \frac{\frac{p^4}{8m^3 c^2}}{\frac{p^2}{2m}} = \frac{p^2}{4m^2 c^2} = \frac{1}{4} \left(\frac{v}{c} \right)^2 \approx \alpha^2$$

🌈 *Couplage Spin-orbite :*

L'électron se déplace à la vitesse $\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m}$ dans le champ électrostatique $\vec{E}$ créé par le proton. La relativité restreinte indique qu'il apparaît dans le référentiel propre de l'électron un champ magnétique $\vec{B}'$:

$$\vec{B}' = -\frac{1}{c^2} \vec{v} \wedge \vec{E}$$

L'interaction entre le moment magnétique de l'électron $\vec{M}_s$ et le champ magnétique $\vec{B}'$:

$$W_{s.o} = -\vec{M}_s \cdot \vec{B}'$$

$$\text{Avec : } \vec{M}_s = -\frac{q}{m_e} \vec{S} = -g\mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} ; g=2 ; \mu_B = \frac{q\hbar}{2m}$$

$$\vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}V(r)} = \frac{1}{q} \frac{dV}{dr} \vec{r} ; \text{ avec } V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

$$\vec{B}' = -\frac{1}{qc^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \frac{\vec{p}}{m} \wedge \vec{r} = \frac{1}{q} \frac{1}{mc^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} ; \text{ avec } \vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$$

$$\longrightarrow W_{s.o} = \frac{1}{m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{e^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Ordre de grandeur :

$$\text{On a : } L \sim \hbar ; S \sim \hbar ; r \sim a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

$$\text{D'où : } \frac{W_{s.o}}{H_0} \approx \frac{\frac{e^2 \hbar^2}{m^2 r^3 c^2}}{\frac{e^2}{r}} = \frac{\hbar^2}{m^2 r^2 c^2} = \frac{e^4}{c^2 \hbar^2}$$

$$\frac{W_{s.o}}{H_0} \sim \alpha^2 = \left(\frac{1}{137} \right)^2$$

Terme de Darwin :

L'électron n'est pas ponctuel, il explore une région de l'espace, une sphère de rayon la longueur d'onde de Compton ($\lambda_c = \frac{h}{mc}$), et possèdent une densité de charge électronique η :

$$W = \int \eta(\vec{r}') V(\vec{r}) d\tau = \int \eta(\vec{R}) d\tau \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{R} + \vec{r}'|}$$

Les charges réparties uniformément :

$$W = V(\vec{r}) + \frac{1}{8} \left(\frac{h}{mc} \right)^2 \Delta V(r) \longrightarrow W_D = \frac{1}{8} \left(\frac{h}{mc} \right)^2 \Delta V(r)$$

Ordre de grandeur :

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \rightarrow V = -e^2 \Delta \left(\frac{1}{r} \right) = e^2 4\pi \delta(r)$$

$$\text{D'où : } W_D \approx mc^2 \frac{e^8}{h^4 c^4} = mc^2 \alpha^4$$

$$\text{or } H_0 \approx \frac{p^2}{2m} = mc^2 \alpha^2, \text{ alors : } \frac{W_D}{H_0} \approx \alpha^2 = \left(\frac{1}{137} \right)^2$$

III-2- Corrections sur l'énergie :

Jusqu'à ici, l'énergie de l'atome d'Hydrogène ne dépend que du nombre quantique n : les états $2s(n=2, l=0)$ et $2p(n=2, l=1)$ ont donc même énergie, égale à :

$$\frac{-E_I}{4} = -\frac{1}{8} \mu c^2 \alpha^2$$

$$n=2 \begin{cases} \boxed{2s} \rightarrow l=0; m=0 \\ \boxed{2p} \rightarrow l=1; m=1,0,-1 \end{cases}$$

$g=4$ fois dégénéré + Spin de l'électron $\longrightarrow$ 8 fois dégénéré

On sait que : $H = H_0 + W_f$

$W_f = W_{\text{rel}} + W_{\text{s.o}} + W_D$ ne corrige pas les sous couches $2s$ et $2p$.

✚ Corrections relativistes :

$$\Delta E_{nl}^r = -\frac{1}{8} \left\langle nl \left| \frac{p^4}{m^3 c^2} \right| nl \right\rangle \text{ or } \frac{p^4}{4m^3 c^2} = \left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 \frac{1}{mc^2} = \frac{1}{mc^2} (H_0 - V)^2$$

$$= \frac{-1}{mc^2} \langle H_0^2 + V^2 - VH_0 - H_0 V \rangle_{nl}$$

$$\langle W_{rel} \rangle_{nl} = -\frac{1}{2mc^2} (E_n^2 + \langle V^2 \rangle_{nl} - 2E_n \langle V \rangle_{nl})$$

On trouve :

$$\Delta E_{nl}^r = \begin{cases} \langle W_r \rangle_{1s} = -\frac{5}{8} m_e c^2 \alpha^4 \\ \langle W_r \rangle_{2s} = -\frac{13}{128} m_e c^2 \alpha^4 \\ \langle W_r \rangle_{2p} = -\frac{7}{384} m_e c^2 \alpha^4 \end{cases}$$

✚ Corrections de Darwin :

$$\Delta E_d = \frac{\pi e^2}{2} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 |\psi_{n,l=0}(0)|^2 \begin{cases} \langle W_D \rangle_{1s} = m_e c^2 \alpha^4 \\ \langle W_D \rangle_{1s} = m_e c^2 \alpha^4 \\ \langle W_D \rangle_{1s} = 0 \end{cases}$$

$$= 0 \text{ si } l \neq 0$$

✚ Correction Spin-orbite :

$$\Delta E_d = \langle W_{s.o} \rangle_{nl} = \langle nl | \in(r) \vec{L} \cdot \vec{S} | nl \rangle ; \in(r) = \frac{e^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r^3}$$

* $\langle l=0, m_l=0 | W_{s.o} | l=0, m_l=0 \rangle$ fait intervenir des éléments de matrices angulaires de la forme $\langle l=0, m_l=0 | L_{x,y,z} | l=0, m_l=0 \rangle$ qui sont nuls.

$$* \langle l=1, s=1/2, m_l, m_s | \in(r) \vec{L} \cdot \vec{S} | l=1, s=1/2, m_l, m_s \rangle = \epsilon_{2p} \langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle_{l=1}$$

$$\epsilon_{2p} = \frac{e^2}{2m^2 c^2} \int_0^\infty \frac{1}{r^3} |R_{21}(r)|^2 r^2 dr = \frac{1}{48 \hbar^2} m_e c^2 \alpha^4$$

Les variables radiales ont disparu, et nous sommes ramenés à la diagonalisation de l'opérateur $\vec{L} \cdot \vec{S}$, soit dans la base découplé, soit dans la base couplé.

✚ Positions des niveaux :

- Niveau $2s_{1/2}$:

$$\Delta E = \left(-\frac{13}{128} + \frac{1}{16} \right) \alpha^4 mc^2 = -\frac{5}{128} \alpha^4 mc^2$$

- Niveau $2p_{1/2}$:

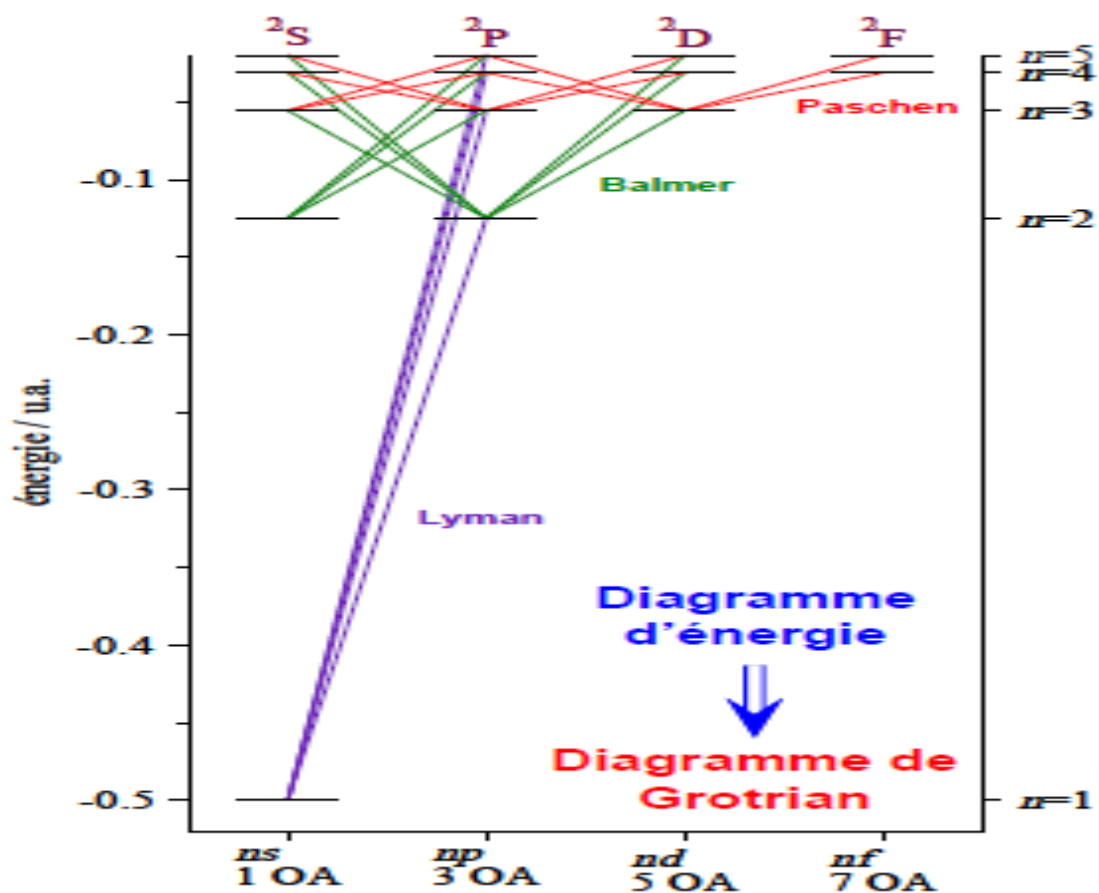
$$\Delta E = \left(-\frac{7}{384} + \frac{1}{48} \right) \alpha^4 mc^2 = -\frac{5}{128} \alpha^4 mc^2$$

- Niveau $2p_{3/2}$:

$$\Delta E = \left(-\frac{7}{384} + \frac{1}{96} \right) \alpha^4 mc^2 = -\frac{1}{128} \alpha^4 mc^2$$

- Niveau $1s_{1/2}$:

$$\Delta E = \left(-\frac{5}{8} + \frac{1}{2} \right) \alpha^4 mc^2 = -\frac{1}{8} \alpha^4 mc^2$$



IV- STRUCTURE HYPERFINE DE L'ATOME D'HYDROGENE (Niveau $n=1$)

IV-1- Rappel :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{L'électron: } S = 1/2; \vec{M}_s = -2 \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}; \mu_B = \frac{q\hbar}{2m} \text{ magnéton de Bohr} \\ \text{Le proton: } I = 1/2; \vec{M}_I = g_p \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{I}; \mu_n = \frac{q\hbar}{2m} \sim \frac{\mu_B}{2000} \left(\frac{M}{m} \sim 2000 \right) \end{array} \right.$$

Le proton est également une particule de spin $1/2$, g est le facteur de Landé, vaut 2 pour l'électron, et $g_p \approx 5.585$ pour le proton.

$\mu_n \ll \mu_B$: le magnétisme nucléaire est négligeable ; quand on étudie le magnétisme de la matière, c'est donc le magnétisme électronique.

Pour le niveau 1s, il n'ya pas de dégénérescence orbitale ($l=0$). Par contre, les composantes S_z et I_z de $\vec{S}$ et $\vec{I}$ peuvent toujours prendre deux valeurs : $m_s = \pm 1/2$ et $m_I = \pm 1/2$. La dégénérescence du niveau 1s est donc égale à 4, et une base possible dans cette multiplicité est formée par les vecteurs :

$$\left\{ |n = 1; l = 0; m_l = 0; m_s = \pm 1/2; m_I = \pm 1/2\rangle \right\}$$

IV-2- Intérêts :

- ❖ Maser à l'hydrogène ; mesure clivage hyperfin connue avec 12 chiffres significatifs
- ❖ Raie 21 cm de l'hydrogène en astrophysique
- ❖ Mesure des spins et moments magnétiques nucléaires
- ❖ Etalon de temps, horloge atomique (effet interne, peu influencé par l'extérieur)

IV-3- Hamiltonien de structure hyperfine W_{hf} :

L'électron se déplace donc, non seulement dans le champ électrostatique du proton, mais également dans le champ magnétique créé par le moment magnétique nucléaire $\vec{M}_I$. Lorsqu'on introduit le potentiel vecteur correspondant dans l'équation de Schrödinger (comme les interactions hyperfines sont des termes correctifs très faibles, on peut se contenter de les déduire de l'équation non-relativiste de Schrödinger), on trouve qu'il faut ajouter à l'hamiltonien de structure fine obtenu par l'équation de Dirac dans le domaine faiblement relativiste, une série de termes supplémentaires dont l'expression est :

$$W_{hf} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \frac{q}{m_e R^3} \vec{M}_I \vec{L} + \frac{1}{R^3} [3(\vec{M}_s \cdot \vec{n})(\vec{M}_I \cdot \vec{n}) - \vec{M}_s \vec{M}_I] + \frac{8\pi}{3} \vec{M}_s \vec{M}_I \delta(\vec{R}) \right\}$$

Où : $\vec{M}_s$ est le moment magnétique de spin de l'électron, $\vec{n}$ le vecteur unitaire de la droite qui joint le proton à l'électron.

Portons les expressions de $\vec{M}_s$ et $\vec{M}_I$ dans l'expression de W_{hf} :

$$\Rightarrow W_{hf} = \frac{\mu_0}{4\pi} 2g_p \mu_n \mu_B \left\{ \underbrace{\frac{\vec{L} \cdot \vec{I}}{r^3}}_{(a)} + \underbrace{\frac{3(\vec{I} \cdot \vec{r})(\vec{S} \cdot \vec{r})}{r^5} - \frac{\vec{S} \cdot \vec{I}}{r^3}}_{(b)} + \underbrace{\frac{8\pi}{3} \vec{S} \cdot \vec{I} \delta(\vec{r})}_{(c)} \right\}$$

(a) : Interaction du moment magnétique nucléaire $\vec{M}_I$ avec le champ magnétique créé au niveau du proton par l'électron.

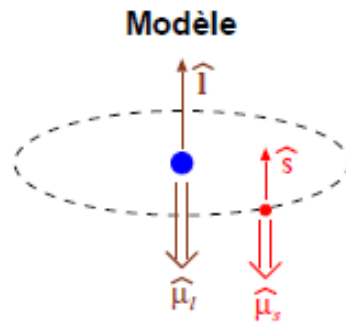


Figure : L'interaction entre deux moments magnétiques

(b) : Interaction dipôle-dipôle entre les moments magnétiques électronique et nucléaire: Interaction entre $\vec{M}_S$ et le champ magnétique créé par $\vec{M}_I$ (ou vice versa).

(c) : Terme de contact, se trouve rigoureusement si on utilise l'équation de Dirac. Il provient de la singularité en $r=0$ du champ créé par le moment $\vec{M}_I$. En réalité le proton comme l'électron n'est pas ponctuel ; on montre que le champ à l'intérieur du proton n'a pas la même forme que le champ créé à l'extérieur par $\vec{M}_I$. Le terme de contact décrit l'interaction de $\vec{M}_S$ avec le champ magnétique existant à l'intérieur du proton.

IV-4- Structure hyperfine du niveau $n=1$:

W_f ne lève pas la dégénérescence du niveau fondamental $1s$, il n'a pas de structure fine ($1s_{1/2} \rightarrow \Delta E = -\frac{1}{8}\alpha^4 mc^2$: déplacement en bloc).

$$|n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = \pm \frac{1}{2}, m_I = \pm \frac{1}{2}\rangle$$

(a) : conduit à des éléments de matrice « angulaires » $\langle l = 0, m_l = 0 | L | l = 0, m_l = 0 \rangle$ qui sont nuls (car $l = 0$).

(b) : les éléments de matrice sont nuls par suite de la symétrie sphérique de l'état $1s$ ($\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$)

(c) : terme de contact :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{100} | \vec{S} \cdot \vec{I} \delta(\vec{r}) | \psi_{100} \rangle &= |\psi_{100}(0)|^2 \langle m_s m_I | \vec{S} \cdot \vec{I} | m_s m_I \rangle \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} \langle m_s m_I | \vec{S} \cdot \vec{I} | m_s m_I \rangle \end{aligned}$$

➡ $H_{\text{cont}} = A \vec{S} \cdot \vec{I}$ avec $A = \frac{1}{\pi a_0^3} \frac{\mu_0}{4\pi\hbar^2} 2g\mu_n\mu_B \approx \frac{4}{3\hbar^2} g \frac{m}{M} \alpha^4 m c^2$

Nous sommes donc ramenés à un problème de deux spins $\frac{1}{2}$, I et S couplés par une interaction de la forme $A \vec{S} \cdot \vec{I}$. En pose :

$\vec{F} = \vec{S} + \vec{I}$ est le moment cinétique totale ;

$$\vec{I} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (F^2 - S^2 - I^2)$$

$$A \vec{S} \cdot \vec{I} |F, m\rangle = \frac{A}{2} \hbar^2 \left[F(F+1) - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right] |F, m\rangle$$

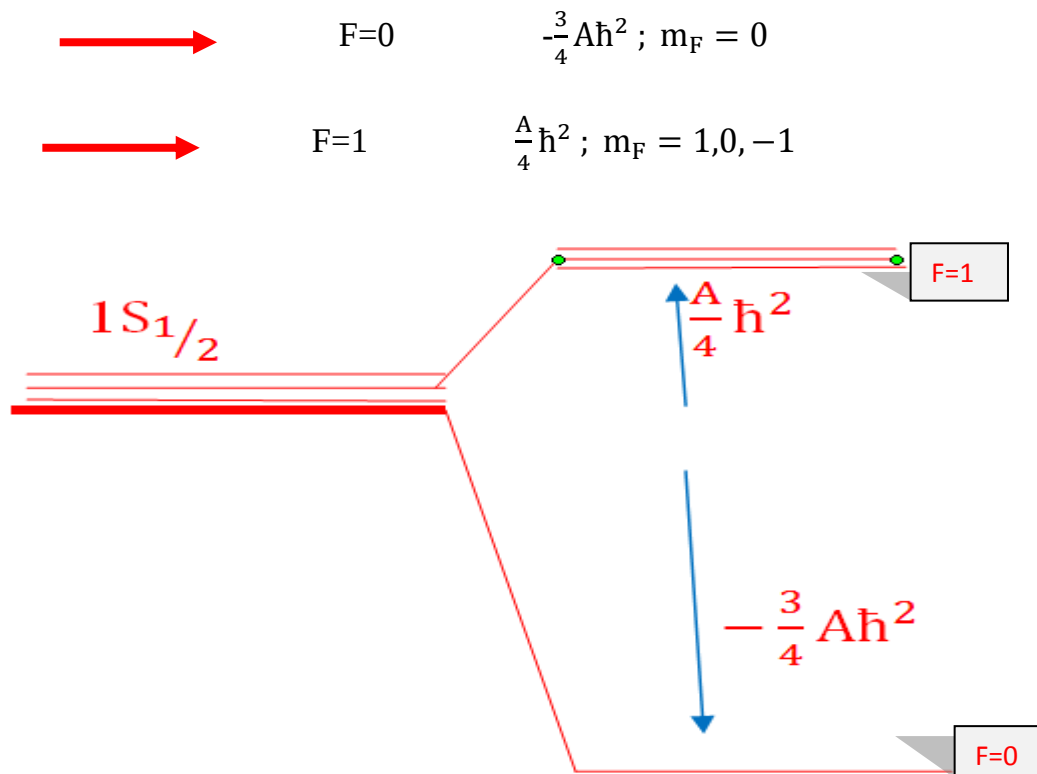


Figure : Structure hyperfine du niveau $n=1$ de l'atome d'hydrogène

Sous l'effet de W_f , le niveau $n=1$ subit un déplacement global égal à $\frac{-m_e c^2 \alpha^4}{8}$; J ne peut prendre qu'une seule valeur, $J=1/2$. Lorsqu'on tient compte du couplage hyperfin W_{hf} , le niveau $1S_{1/2}$ se scinde en deux niveaux hyperfins $F=1$ et $F=0$. La transition hyperfine :

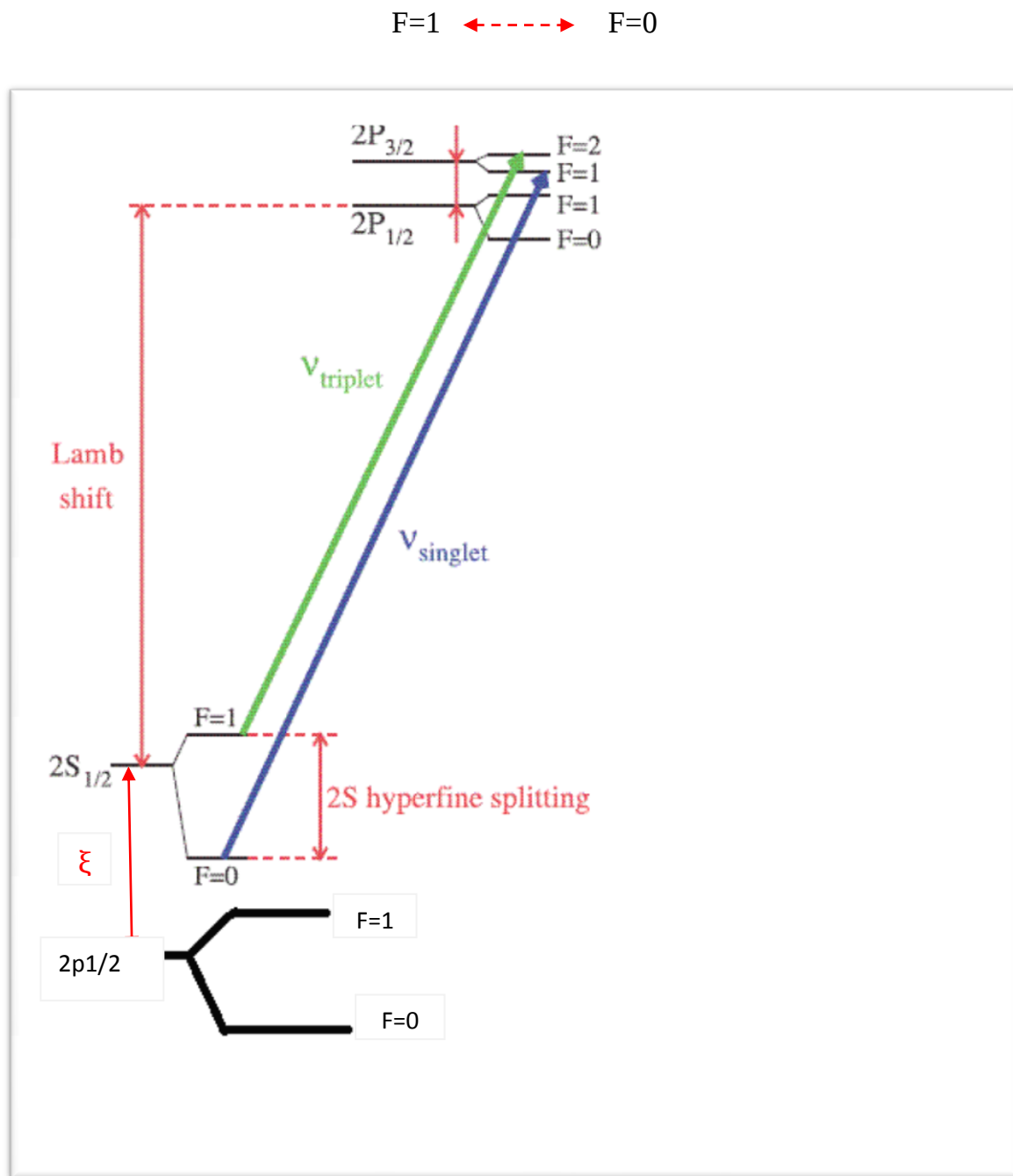


Figure : Structure hyperfine du niveau $n=2$ de l'atome d'hydrogène

L'écart ξ entre les deux niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ est le déplacement de Lamb, environ dix fois plus petit que l'intervalle de structure fine (l'intervalle qui sépare les deux niveaux $2p_{3/2}$ et $2p_{1/2}$). Lorsqu'on tient compte du couplage hyperfin W_{hf} , chaque niveau se scinde en deux sous-niveaux hyperfins (la valeur correspondante du nombre quantique F , est indiquée sur la partie droite de la figure).

IV-5- Conclusion :

- ❖ La structure hyperfine du niveau fondamental de l'atome d'hydrogène est la grandeur physique qui est connue actuellement avec la grande précision :

$$\frac{A\hbar}{2\pi} = 1\,420\,405\,751,768 \pm 0,001\text{Hz}$$

- ❖ Une telle précision expérimentale a été rendue possible grâce à la réalisation en 1963, du « maser à hydrogène ».
- ❖ W_{hf} décompose chacun des niveaux de structure fine $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ en une série de niveaux hyperfins :

$$|J - I| \leq F \leq |J + I|$$

V- L'EFFET D'UN CHAMP MAGNETIQUE SUR L'ATOME D'HYDROGENE

V-1- Effet Zeeman :

En physique atomique, l'effet Zeeman apparait lorsqu'une source de lumière est soumise à un champ magnétique statique: les raies spectrales de cette source possèdent plusieurs composantes chacune d'elle présentant une certaine polarisation. L'effet a pour origine la subdivision des niveaux d'énergie des atomes ou des molécules plongées dans un champ magnétique. Selon les conditions, les raies spectrales se divisent en un nombre impair de composante (et l'effet est dit « normal ») ou bien en un nombre pair (et l'effet est dit « anormal »).

V-2- Effet Zeeman de structure hyperfine du niveau fondamental 1s :

Nous supposons maintenant que l'atome est plongé dans un champ magnétique statique uniforme $\vec{B}_0$ parallèle à (oz). Ce champ interagit avec les divers moments magnétiques présent dans l'atome : moment magnétique orbital et de spin de l'électron, $\vec{M}_l = -\mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar}$ et $\vec{M}_s = -2\mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar}$; moment magnétique du noyau:

$$\vec{M}_I = g\mu_n \frac{\vec{I}}{\hbar}$$

L'hamiltonien Zeeman W_z qui décrit l'énergie d'interaction de l'atome avec le champ $\vec{B}_0$ s'écrit donc :

$$W_z = -\vec{B}_0 (\vec{M}_l + \vec{M}_s + \vec{M}_I) = w_0(L_z + 2S_z) + w_n I_z \quad (6)$$

Ou w_0 (de pulsation de Larmor dans le champ $\vec{B}_0$) et w_n sont définis par :

$$\begin{cases} w_0 = -\frac{q}{2m_e} B_0 \\ w_n = \frac{q}{2M_p} g_p B_0 \end{cases}$$

Comme $M_p \gg m_e$, on a bien sur : $|w_0| \gg |w_n|$

$$\longrightarrow H = H_0 + W_f + W_{hf} + W_z$$

Nous avons vu précédemment que le niveau 1s de l'atome d'hydrogène ne possède qu'une structure hyperfine mais pas de structure fine. (Le cas du niveau $n=2$ est légèrement plus compliqué car, en champ magnétique nul, ce niveau possède à la fois une structure fine et hyperfine).

A l'intérieur de la multiplicité $n=1$, la restriction de W_{hf} pouvait se mettre sous la forme : $A \vec{I} \cdot \vec{S}$

En utilisant l'expression (6) de W_z , on voit qu'il faut en plus calculer des éléments de matrice de la forme :

$$\langle n=1; l=0; m_L=0; m'_s; m'_I | w_0(L_z + 2S_z) + w_n I_z | n=1; l=0; m_L=0; m_s; m_I \rangle$$

Or l et m_L sont nuls, ce qui entraînent la nullité de la contribution de $w_0 L_z$:

$$\langle n=1; l=0; m_L=0 | n=1; l=0; m_L=0 \rangle = 1$$

On obtient alors, la perturbation : $H' = 2w_0 S_z + A \vec{I} \cdot \vec{S} + w_n I_z$

D'après : $|w_0| \gg |w_n|$ on peut négliger dans la suite le terme $w_n I_z$ devant les deux premières termes de H' , d'où la perturbation « vue » par le niveau fondamental 1s s'écrit finalement : $H' = 2w_0 S_z + A \vec{I} \cdot \vec{S}$; ou $2w_0 S_z$ terme du Zeeman.

V-3- Effet Zeeman en distinction des différents domaines de champ :

En faisant varier B_0 , on peut modifier de façon continue l'importance du terme de Zeeman $2w_0 S_z$, nous distinguerons trois domaines de champ, selon les ordres de grandeur respectifs du terme hyperfin et du terme Zeeman.

🌈 Effet Zeeman en champ faible ($\hbar w_0 \ll A\hbar^2$) :

Les états propres et valeurs propres de $A \vec{I} \cdot \vec{S}$ calculées précédemment permettent d'obtenir deux multiplicités :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{A\hbar^2}{4} : \{|F=1; m_F = -1, 0, 1\rangle\}, \text{dégénérée trois fois} \\ -\frac{3A\hbar^2}{4} : \{|F=0; m_F = 0\rangle\}, \text{non dégénérée} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} |1,1\rangle_{B.C} = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ |1,0\rangle_{B.C} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ |1,-1\rangle_{B.C} = \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ |0,0\rangle_{B.C} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \end{array} \right\}$$

Avec $\{|F; m_F\rangle_{B.C}\}$ la base couplée aux sous-espace $F=1$ et $F=0$.

Comme $2w_0 S_z$ une perturbation par rapport à l'hamiltonien $H_0 + A \vec{I} \cdot \vec{S}$, il faut maintenant diagonaliser séparément les deux matrices représentants $2w_0 S_z$ dans les deux multiplicités $F=1$ et $F=0$ correspondants aux deux valeurs propres distincts ($\frac{A\hbar^2}{4}$ et $-\frac{3A\hbar^2}{4}$). On obtient aisément dans la base $\{|F, m_F\rangle\}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} S_z |1,1\rangle_{B.C} = \frac{\hbar}{2} |1,1\rangle \\ S_z |1,0\rangle_{B.C} = \frac{\hbar}{2} |0,0\rangle \\ S_z |1,-1\rangle_{B.C} = -\frac{\hbar}{2} |1,-1\rangle \\ S_z |0,0\rangle_{B.C} = \frac{\hbar}{2} |1,0\rangle \end{array} \right. \quad \longrightarrow \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



$$2w_0 S_z = \begin{pmatrix} \hbar w_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hbar w_0 \\ 0 & 0 & -\hbar w_0 & 0 \\ 0 & \hbar w_0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

D'après les résultats précédents, la matrice représentant $2w_0 S_z$ dans la multiplicité $F=1$ s'écrit :

$$2w_0 S_z = \begin{pmatrix} \hbar w_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar w_0 \end{pmatrix}$$

Dans la multiplicité $F=0$, cette matrice se réduit à un nombre égal à 0.

Ces deux matrices étant diagonales, on en déduit immédiatement les états propres (à l'ordre zéro en w_0) et les valeurs propres (à l'ordre un en w_0) en champ faible :

<i>Etats propres</i>	<i>Valeurs propres</i>
$ F=1; m_F=1\rangle \leftrightarrow$	$\frac{A\hbar^2}{4} + \hbar w_0$
$ F=1; m_F=0\rangle \leftrightarrow$	$\frac{A\hbar^2}{4} + 0$
$ F=1; m_F=-1\rangle \leftrightarrow$	$\frac{A\hbar^2}{4} - \hbar w_0$
$ F=0; m_F=0\rangle \leftrightarrow$	$-3 \frac{A\hbar^2}{4} + 0$

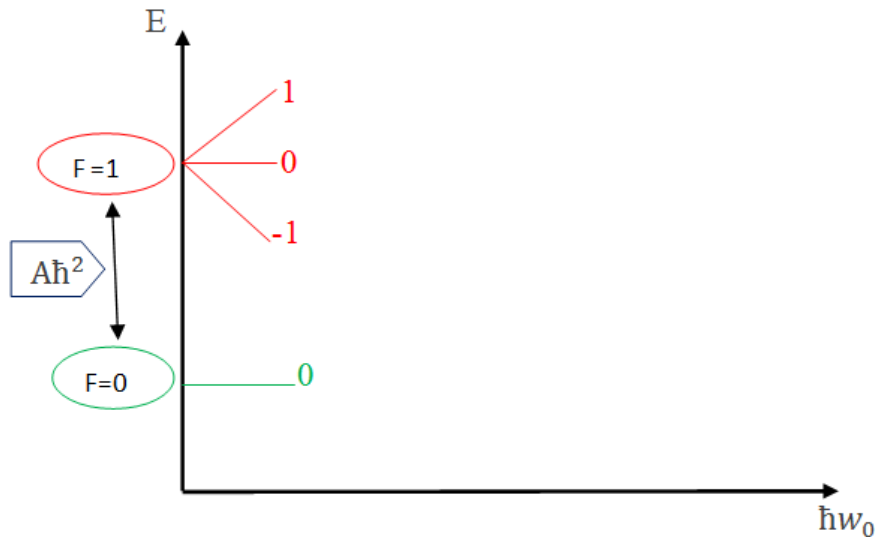


Diagramme Zeeman en champ faible du niveau 1s de l'atome d'hydrogène.

$F=1$ se scinde en trois niveaux équitants, $F=0$ ne subit aucun déplacements au 1^{er} ordre en w_0 .

Le traitement précédent est valable tant que l'écart $\hbar w_0$ entre deux sous-niveaux Zeeman consécutifs de la multiplicité $F=1$ reste petit devant l'écart entre les niveaux $F=1$ et $F=0$ en champ nul (structure hyperfine).

✚ Effet Paschen-Back (Zeeman en champ fort) ($\hbar w_0 \gg A\hbar^2$) :

Il faut maintenant diagonaliser en première lieu le terme Zeeman.

- **Etats propres et valeurs propres du terme Zeeman :**

Ce terme est diagonal dans la base $\{|m_s, m_l\rangle\}$:

$$2w_0 S_z |m_s, m_l\rangle = 2m_s \hbar w_0 |m_s, m_l\rangle$$

Comme $m_s = \pm \frac{1}{2}$, les valeurs propres sont égales à $\pm \hbar w_0$. Chacune d'elles est dégénérée deux fois, à cause des deux valeurs possibles de m_l . On a donc :

$$\begin{cases} 2w_0 S_z |+, \pm\rangle = +\hbar w_0 |+, \pm\rangle \\ 2w_0 S_z |-, \pm\rangle = -\hbar w_0 |-, \pm\rangle \end{cases}$$

(Nous écrirons souvent $|\varepsilon_s, \varepsilon_l\rangle$ à la place de $|m_s, m_l\rangle$, ε_s et ε_l étant égaux à $+$ ou $-$ suivant le signe de m_s et m_l)

Remarquons tout d'abord que, les vecteurs des deux sous-espaces $\{|+, \pm\rangle\}$ et $\{|-, \pm\rangle\}$ sont également vecteurs propres du terme $2w_0 S_z$.

Les deux matrices représentant $A\vec{I} \cdot \vec{S}$ dans ces deux sous-espaces sont donc diagonales, et leurs valeurs propres sont tout simplement les éléments diagonaux $\langle m_s; m_l | A\vec{I} \cdot \vec{S} | m_s; m_l \rangle$ que l'on peut écrire encore, en utilisant la relation :

$$\vec{I} \cdot \vec{S} = I_z S_z + \frac{1}{2}(I_+ S_- + I_- S_+)$$

$$\begin{aligned} \text{Sous la forme : } \langle m_s, m_l | A\vec{I} \cdot \vec{S} | m_s, m_l \rangle &= \langle m_s, m_l | A I_z S_z | m_s, m_l \rangle \\ &= A \hbar^2 m_s m_l \end{aligned}$$

Finalement les états propres et les valeurs propres en champ fort sont :

<i>Etats propres</i>		<i>Valeurs propres</i>
$ +, +\rangle$	$\leftrightarrow$	$\frac{Ah^2}{4} + \hbar w_0$
$ +, -\rangle$	$\leftrightarrow$	$\hbar w_0 - \frac{Ah^2}{4}$
$ -, +\rangle$	$\leftrightarrow$	$-\frac{Ah^2}{4} - \hbar w_0$
$ -, -\rangle$	$\leftrightarrow$	$-\hbar w_0 + \frac{Ah^2}{4}$

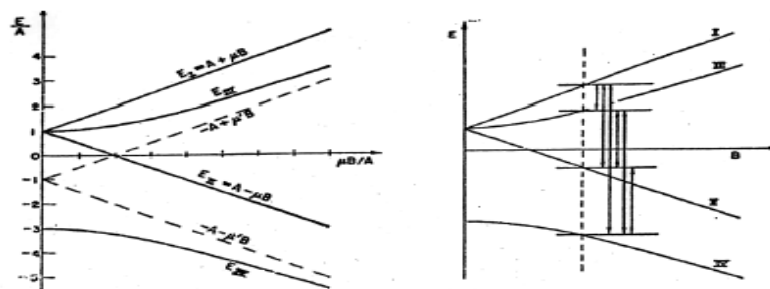


Figure : Diagramme Zeeman en champ fort du niveau fondamental 1s de l'atome d'hydrogène

- **Remarque :**

On peut interpréter de la façon suivante l'écart $\frac{A\hbar^2}{2}$ qui existe en champ fort entre les deux niveaux $|+, +\rangle$ et $|+, -\rangle$, ou $|-, +\rangle$ et $|-, -\rangle$. Nous avons vu que seul le terme $I_z S_z$ de l'expression de $\vec{I} \cdot \vec{S}$ intervient en champ fort, lorsqu'on traite le couplage hyperfine comme une perturbation vis-à-vis du terme Zeeman. L'hamiltonien total peut donc s'écrire en champ fort :

$$2w_0 S_z + A I_z S_z = 2 \left(w_0 + \frac{A}{2} I_z \right) S_z$$

Tout se passe donc comme si le spin électronique « voyait », en plus du champ extérieur $\vec{B}_0$, un champ interne plus petit, provenant du couplage hyperfine entre $\vec{I}$ et $\vec{S}$, et prenant deux valeurs possibles suivant que le spin nucléaire pointe vers le haut ou vers le bas.

 *Effet Zeeman en champ intermédiaire ($\hbar w_0 \approx A\hbar^2$) :*

Il faut diagonaliser la matrice représentant la perturbation totale $2w_0 S_z + A \vec{I} \cdot \vec{S}$ en travaillant dans la base $\{|F, m_F\rangle\}$.

Les états $|F, m_F\rangle$ sont états propres de l'opérateur $A \vec{I} \cdot \vec{S}$. La matrice représentant cet opérateur dans la base $\{|F, m_F\rangle\}$ est donc diagonale : les éléments diagonaux correspondants à $F=1$ sont égaux à $\frac{A\hbar^2}{4}$, celui correspondant à $F=0$ à $-\frac{3A\hbar^2}{4}$. Par ailleurs, nous avons déjà écrit la matrice représentant S_z dans la même base. Il est alors très simple d'écrire la matrice représentant la perturbation totale. En rangeant les vecteurs de base dans l'ordre :

$$B' = \{|1, 1\rangle, |1, -1\rangle, |1, 0\rangle, |0, 0\rangle\}, \text{ on obtient ainsi :}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{A\hbar^2}{4} + \hbar\omega_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{A\hbar^2}{4} - \hbar\omega_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A\hbar^2}{4} & \hbar\omega_0 \\ 0 & 0 & \hbar\omega_0 & -\frac{3A\hbar^2}{4} \end{pmatrix}$$

Cette matrice se décompose en deux matrices 1×1 et 2×2 . Les deux matrices 1×1 fournissent immédiatement deux valeurs propres :

$$\begin{cases} E_1 = \frac{A\hbar^2}{4} + \hbar\omega_0 \\ E_2 = \frac{A\hbar^2}{4} - \hbar\omega_0 \end{cases}$$

Correspondant respectivement à l'état $|1,1\rangle$ (ou encore à l'état $|+, +\rangle$) et à l'état $|1, -1\rangle$ (ou encore à l'état $|-, -\rangle$).

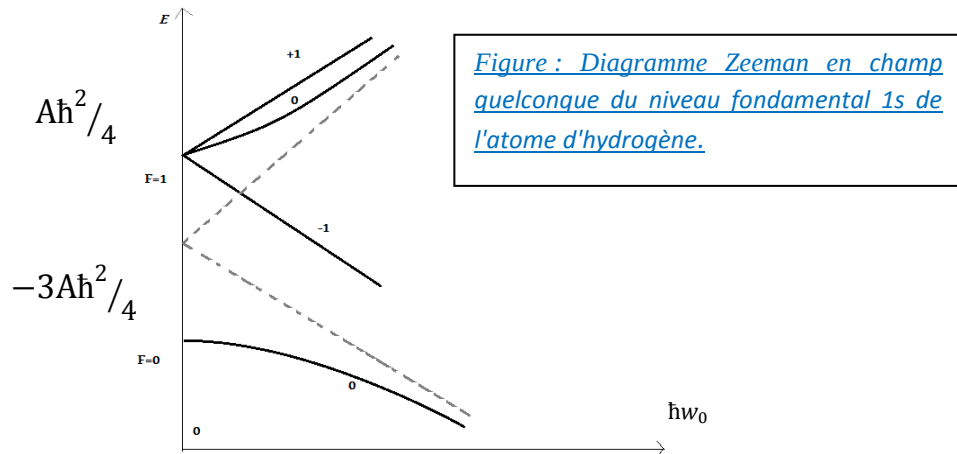
L'équation aux valeurs propres de la matrice 2×2 restante s'écrit :

$$\left(\frac{A\hbar^2}{4} - E\right)\left(-\frac{3A\hbar^2}{4} - E\right) - \hbar^2\omega_0^2 = 0$$

Les deux racines de cette équation se calculent aisément :

$$\begin{cases} E_3 = -\frac{A\hbar^2}{4} + \sqrt{\left(\frac{A\hbar^2}{2}\right)^2 + \hbar^2\omega_0^2} \\ E_4 = -\frac{A\hbar^2}{4} - \sqrt{\left(\frac{A\hbar^2}{2}\right)^2 + \hbar^2\omega_0^2} \end{cases}$$

L'ensemble des résultats précédents est regroupé sur la figure ci-dessous, qui représente le diagramme Zeeman du niveau fondamental $1s$.



Selon la figure, les deux droites de pente +1 et -1 de m_F passant en champ nul par le point $+\frac{A\hbar^2}{4}$ (comportement asymptotique), représentent donc, quel que soit le champ $\vec{B}_0$, deux des sous-niveaux Zeeman.

V-4- Effet STARK :

🌈 Définition :

L'Effet Stark est l'étude de l'effet d'un champ électrique statique sur le niveau fondamental ($n=1$) et le premier niveau excité ($n=2$) de l'atome d'hydrogène, en tenant compte de l'existence d'une dégénérescence entre deux niveaux de parité différente.

Considérons un atome d'hydrogène plongé dans un champ électrique statique uniforme E parallèle à oz . À l'hamiltonien Zeeman W_z on ajoute l'hamiltonien Stark W_s qui décrit l'énergie d'interaction du moment dipolaire électrique de l'atome d'hydrogène avec le champ E , tel que :

$$W_s = -q\vec{E} \cdot \vec{R} = -qE \cdot Z$$

Où W_s est petit devant H_0 , et par la théorie de perturbation on doit **calculer l'effet de W_s sur les états propres de l'hamiltonien non-perturbé H_0 .**

🌈 Effet Stark du niveau $n=1$:

D'après la théorie des perturbations, l'effet du champ du champ électrique s'obtient au premier ordre en calculant l'élément de matrice $-qE\langle n=1, l=0, m_l=0 | Z | n=1, l=0, m_l=0 \rangle$.

Comme l'opérateur Z est impaire et que le niveau fondamental est pair, l'élément de matrice précédent est nul.

⇒ Il n'y a donc pas d'effet linéaire en champ E d'où la nécessité de passer au terme suivant de la série de perturbation. On en conclut qu'à l'ordre le plus bas en E , le déplacement Stark du niveau fondamental $1s$ est quadratique.

En présence du champ électrique E parallèle à oz , l'état fondamental non-perturbé n'est plus $|1,0,0\rangle$; dont les valeurs moyennes des composants de l'opérateur $q\vec{R}$ dans l'état fondamental perturbé est $\langle \Psi_0 | q\vec{R} | \Psi_0 \rangle$.

On en déduit alors, que le champ électrique E fait apparaître un moment dipolaire « induite » proportionnel à E , dont le coefficient de proportionnalité est la susceptibilité électrique linéaire, par conséquent la mécanique quantique permet d'expliquer cette susceptibilité.

Effet Stark du niveau $n=2$:

L'effet de W_s sur le niveau $n=2$ s'obtient au première ordre en diagonalisant la restriction de W_s à l'intérieur du sous-espace engendré par des quatre états de bases $\{|2,0,0\rangle, |2,1,m\rangle; m = 1,0,-1\}$; avec l'état $|2,0,0\rangle$ est pair, les trois états $|2,1,m\rangle$ sont impaires. Comme W_s est impair, l'élément de matrice $\langle 2,0,0 | W_s | 2,0,0 \rangle$ est nul. Par contre comme les états $|2,0,0\rangle$ et $|2,1,m\rangle$ sont de parité opposée, l'élément de matrice $\langle 2,1,m | W_s | 2,0,0 \rangle$ peut être différent de zéro. En fait, on peut déduire aisément, en utilisant les relations d'orthogonalité des harmoniques sphériques que seul $\langle 2,1,0 | W_s | 2,0,0 \rangle$ est non-nul. En effet W_s est proportionnel à Z , donc à $y_1^0(\theta)$. L'intégrale angulaire qui intervient dans l'élément de matrice $\langle 2,1,m | W_s | 2,0,0 \rangle$ est donc de la forme :

$$\int y_1^{m*}(\Omega) y_1^0(\Omega) y_0^0(\Omega) d\Omega$$

Où y_0^0 est une constante, cette intégrale est proportionnel au produit scalaire de y_1^0 par y_1^m , et n'est donc différent de zéro que si $m=0$. De plus comme $y_1^0, R_{2,0}(r)$ et $R_{2,1}(r)$ sont réels, l'élément de matrice correspondant de W_s est réel, en posant :

$$\langle 2,1,0 | W_s | 2,0,0 \rangle = \gamma \varepsilon$$

La matrice représentant W_s dans la multiplicité $n=2$ a donc finalement la forme suivant dont les vecteurs de bases sont rangés dans l'ordre $|2,1,1\rangle, |2,1,-1\rangle, |2,1,0\rangle, |2,0,0\rangle$ tel que :

$$W_s = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma\varepsilon & 0 \end{pmatrix}$$

On en déduit immédiatement les corrections à l'ordre un en ε et les états propres à l'ordre zéro :

Etats propres		correction
$ 2,1,1\rangle$	$\leftrightarrow$	0
$ 2,1,-1\rangle$	$\leftrightarrow$	0
$\frac{1}{\sqrt{2}}(2,1,0\rangle + 2,0,0\rangle)$	$\leftrightarrow$	$\gamma\varepsilon$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(2,1,0\rangle - 2,0,0\rangle)$	$\leftrightarrow$	$-\gamma\varepsilon$

⇒ L'apparition d'un effet Stark linéaire dans le cas de l'atome d'hydrogène est typique de l'existence de deux niveaux de parité opposée et de même énergie.

 *Résultats de l'effet Stark :*

- ❖ Le déplacement Stark du niveau fondamental 1s est quadratique (le niveau fondamental est abaissé)
- ❖ Les états du niveau $n=2$ ne sont pas stables
- ❖ L'hamiltonien Stark W_s ayant un élément de matrice non-nul entre 2s et 2p .

Conclusion générale

L'élaboration de ce travail dans le cadre du projet de la fin d'étude, nous a permis d'approfondir nos connaissances théoriques en Mécanique Quantique et les retombées de cette théorie sur un système physique simple tel que l'Atome d'Hydrogène.

Lors de ce travail, on a essayé de présenter l'étude classique et quantique de cet atome et mettre en évidence l'accord de la théorie quantique avec les résultats expérimentaux.

Ce travail constitue un des multiples aspects de la richesse des données de la théorie quantique. En effet, il permet de mettre les accents sur les points mal traités par la mécanique classique pour une particule soumise à un potentiel central.

Notre projet de fin d'étude consiste à présenter en détail tous ce qui concerne l'atome d'hydrogène du côté physique.

Ce projet nous a donné la possibilité de voir de près à quel point la théorie classique est insuffisante pour le traitement physique d'un système microscopique qu'est l'atome d'hydrogène. Il nous a aussi permis de réaliser à quel point la théorie quantique est en accord avec les expériences du domaine jusqu'à nos jours.

En fin, l'étude de l'atome d'hydrogène ouvre les perspectives larges sur le traitement quantique des atomes pluri-électroniques.

Bibliographie

- [1]-Cours Mécanique Quantique I /SMP-S3/ 2011 auteur : M. Azz-eddine Marrakchi
- [2]- Cours Mécanique Quantique /SMP- S5/ 2013-2014 auteur : M. Anouar Jorio
- [3]- Cours Mécanique Quantique /SMP- S6/ 2014 auteur : M. Izeddine Zorkani
- [4]- Mécanique Quantique Tome I et II auteurs : Claude Cohen-Tanoudji, Bernard Diu , Franck Laloe
- [5]- Mécanique Quantique auteur : Claude Aslangul
- [6]- Mécanique Quantique auteur : Frédéric Mila
- [7]- Mécanique Quantique I auteur : René Cote
- [8]- Physique Théorique Tome 4 LD Landau, E Lifshitz
- [9]- Mécanique Quantique auteur : R. Feynman
- [10]- Cours de Mécanique Quantique auteur : Y. Ayant, E. Belorizky
- [11]- Mécanique Quantique - Le cours de l'École polytechnique J. Dalibard, J.-L. Basdevant
- [12]- Mécanique Quantique – Edgard Elbaz
- [13]- Mécanique Quantique - Albert Messiah
- [14]- Mécanique Quantique – Micheal Le Bellac
- [15]- Physique Atomique - Chpolski

ANNEXE

Constantes physiques

Vitesse de la lumière dans le vide	: $c = 3.00 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$
Constante de Planck	: $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$
Constante de Planck divisée par 2π	: $\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J.s}$
Charge de l'électron ($q_e < 0$)	: $ q_e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
Masse de l'électron	: $m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ $= 0.511 \text{ MeV.c}^{-2}$
Masse du proton	: $m_p = 1.673 \times 10^{-27} \text{ kg}$ $= 938.3 \text{ MeV.c}^{-2}$
Masse du neutron	: $m_n = 1.675 \times 10^{-27} \text{ kg}$ $= 939.5 \text{ MeV.c}^{-2}$
Constante de Rydberg	: $R_\infty = \frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 = 13.61 \text{ eV}$
Magnéton de Bohr	: $\mu_B = \frac{ q_e \hbar}{2m_e} = 5.79 \times 10^{-5} \text{ eV.T}^{-1}$
Magnéton de Bohr nucléaire	: $\mu_N = \frac{ q_e \hbar}{2m_p} = 3.15 \times 10^{-8} \text{ eV.T}^{-1}$
Constante de Boltzmann	: $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$
Constante de gravitation	: $G = 6.67 \times 10^{-11} \text{ N.m}^2.\text{kg}^{-2}$
Conversion énergie-longueur d'onde	: $E = 1 \text{ eV} \longleftrightarrow \lambda = 1.24 \mu\text{m}$
Conversion énergie-fréquence	: $E = 1 \text{ eV} \longleftrightarrow \nu = 2.42 \times 10^{14} \text{ Hz}$
Conversion énergie-température	: $E = 1 \text{ eV} \longleftrightarrow T = 11600 \text{ K}$